

---

---

Optimisation en Temps Réel: Optimiser les  
Performances des Procédés Chimiques  
malgré l’Incertitude et les Erreurs de  
Modélisation

---

---

BILAN DES ACTIVITÉS DE RECHERCHE  
LAUSANNE, LE 12 AOÛT 2014

PAR

**DR. GRÉGORY FRANÇOIS**

*University of Applied Sciences and Arts of Western Switzerland (HES-SO)  
Faculty of Engineering and Architecture  
Delémont, Switzerland*

*Laboratoire d’Automatique  
École Polytechnique Fédérale de de Lausanne  
Lausanne, Switzerland*

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Optimisation des procédés chimiques</b>	<b>12</b>
1.1	Introduction . . . . .	12
1.2	Optimisation statique basée sur un modèle . . . . .	13
1.2.1	Formulation du problème . . . . .	13
1.2.2	Conditions d’optimalité . . . . .	14
1.3	Optimisation dynamique basée sur un modèle . . . . .	15
1.3.1	Formulation . . . . .	15
1.3.2	Principe du Maximum . . . . .	16
1.4	4 Problèmes classiques d’optimisation en génie des procédés chimiques . . . . .	17
1.4.1	Optimisation en régime permanent des réacteurs continus	17
1.4.2	“Scaling-Up” de l’échelle du laboratoire à l’échelle industrielle . . . . .	17
1.4.3	Changement de grade de réacteurs continus en régime permanent . . . . .	18
1.4.4	Optimisation dynamique run-to-run . . . . .	19
1.5	La problématique de l’incertitude . . . . .	19
<b>2</b>	<b>Optimisation en temps réel (RTO)</b>	<b>22</b>
2.1	Etat de l’art . . . . .	22
2.1.1	Classification des méthodes de RTO . . . . .	22
2.1.2	Les approches “Two-Step” . . . . .	24
2.2	“RTO via Modifier Adaptation” (RTO-MA) . . . . .	26
2.2.1	Principe . . . . .	27
2.2.2	“Model adequacy” . . . . .	30
2.3	Exemple illustratif . . . . .	30
<b>3</b>	<b>Axes de Recherche Méthodologique et Contributions dans le domaine de RTO</b>	<b>34</b>
3.1	Introduction . . . . .	34
3.2	Utilisation d’approximations convexes pour garantir l’adéquation du modèle . . . . .	35
3.2.1	Principe . . . . .	35
3.2.2	Méthode pour générer une approximation convexe . . . . .	37

3.2.3	Estimation des gradients du procédé . . . . .	38
3.2.4	Utilisation des mesures en régime permanent . . . . .	39
3.2.5	Utilisation des mesures en régime permanent et du modèle . . . . .	42
3.3	Utilisation des mesures transitoires . . . . .	43
3.3.1	RTO-MA avec des mesures transitoires . . . . .	43
3.3.2	Estimation durant le transitoire des modificateurs d'ordre 0 à l'état stationnaire . . . . .	44
3.3.3	Estimation durant le transitoire des modificateurs d'ordre 1 à l'état stationnaire . . . . .	45
3.4	Exemple illustratif . . . . .	48
3.4.1	Modèle dynamique du réacteur . . . . .	49
3.4.2	Problème d'optimisation . . . . .	49
3.4.3	Optimisation nominale vs. optimisation du procédé . . . . .	50
3.4.4	RTO-MA de régime permanent en régime permanent . . . . .	51
3.4.5	RTO-MA sur la base de mesures transitoires . . . . .	52
3.5	RTO-MA quand les entrées du modèle diffèrent des entrées du procédé réel . . . . .	55
3.6	Conditions suffisantes de faisabilité et d'optimalité . . . . .	58
3.6.1	Principe . . . . .	60
3.6.2	Exemple illustratif d'application des SCFO . . . . .	64
3.6.3	Le solver "SCFO" . . . . .	68
3.7	Optimisation des procédés discontinus, répétés et/ou périodiques . . . . .	69
3.7.1	RTO-MA pour les procédés discontinus . . . . .	69
3.7.2	RTO pour les procédés discontinus en boucle fermée . . . . .	74
<b>4</b>	<b>Axes de Recherche et Contributions Appliquées</b>	<b>78</b>
4.1	Optimisation dynamique de réacteurs industriels de copolymérisation . . . . .	78
4.1.1	Description du procédé . . . . .	79
4.1.2	Optimisation dynamique nominale . . . . .	79
4.1.3	Résultats . . . . .	80
4.1.4	Limites de l'approche . . . . .	82
4.2	Optimisation des Systèmes Énergétiques . . . . .	82
4.2.1	Préambule . . . . .	82
4.2.2	Modélisation, commande et optimisation de systèmes énergétiques (travaux réalisés à l'UPVD) . . . . .	83
4.2.3	Optimisation opératoire de piles à combustible à oxyde solide (SOFC) . . . . .	84
4.2.4	Piles à combustible PEM . . . . .	90
4.2.5	Production d'énergie au moyen de cerf-volants (Kites) . . . . .	90
4.3	Utilisation du solver SCFO pour le réglage itératif de contrôleurs . . . . .	95
4.4	Modélisation commande et optimisation pour le traitement du diabète . . . . .	97
4.4.1	Le diabète de type I . . . . .	99
4.4.2	Le modèle basé sur les paramètres "TPM" . . . . .	100
4.4.3	Validation du TPM . . . . .	104

<b>5</b>	<b>Conclusions et Perspectives</b>	<b>111</b>
5.1	Conclusions . . . . .	111
5.2	Perspectives . . . . .	113
<b>A</b>	<b>Curriculum vitae</b>	<b>117</b>
<b>B</b>	<b>Activités d’enseignement – Activités Administratives</b>	<b>120</b>
B.1	1999-2004 : Assistanat d’enseignement . . . . .	120
B.2	2005-2006 : Enseignant d’algèbre/Chercheur postdoctoral . . . . .	121
B.3	2006-2008 : Maître de Conférences . . . . .	121
B.4	depuis 2008 . . . . .	121
B.5	Encadrements d’Étudiants . . . . .	122
B.6	Activités administratives . . . . .	123
<b>C</b>	<b>Valorisation &amp; transfert – Administration</b>	<b>125</b>
C.1	Projets avec collaboration / financement industriel . . . . .	125
C.1.1	Projets étudiants . . . . .	125
C.1.2	Projets “United States Council for Automotive Research” et “Vinnova Consortium” . . . . .	126
C.1.3	Projet “Aqua+Tech” . . . . .	126
C.1.4	Projet “Opti’Enr” . . . . .	126
C.1.5	Projet “SOFC” . . . . .	126
C.1.6	Projet “Belenos” . . . . .	127
C.1.7	Projet “DACH” . . . . .	127
C.1.8	Projet “SwissKitePower” . . . . .	128
C.1.9	Projet “Diabète” . . . . .	128
C.1.10	Projet “Cloud” . . . . .	128
C.2	Financements obtenus . . . . .	129
C.3	Encadrement . . . . .	129
C.3.1	Masters . . . . .	129
C.3.2	Theses . . . . .	130
C.4	Participation à des jurys . . . . .	130
C.4.1	Jurys de thèse . . . . .	130
C.4.2	Jurys de DEA/master . . . . .	130
C.5	Collaborations universitaires internationales principales . . . . .	131
C.6	Activités de revue . . . . .	131
<b>D</b>	<b>Liste des publications</b>	<b>133</b>
D.1	Revue internationale à comité de lecture . . . . .	133
D.2	Actes de congrès internationaux à comité de lecture . . . . .	135
D.3	Congrès internationaux sans actes . . . . .	137
D.4	Chapitres d’Ouvrages et Monographies . . . . .	137
D.5	Séminaires Invités . . . . .	138

# Table des figures

1.1	Perturbations affectant les différents niveaux de l'architecture de contrôle des procédés [63]. . . . .	20
2.1	Classification des schémas RTO - ISOPE signifie : "Integrated System Optimization and Parameter Estimation" . . . . .	23
2.2	Principe des méthodes two-step. . . . .	25
2.3	Schéma de principe de "RTO via Modifier Adaptation". . . . .	28
2.4	Modification des contraintes lors de "RTO via Modifier Adaptation". . . . .	29
2.5	Application de la méthode two-step (gauche) et de RTO-MA (droite) au réacteur de Williams-Otto. . . . .	32
2.6	Application de la méthode two-step au réacteur de Williams-Otto. . . . .	32
2.7	Application de RTO-MA au réacteur de Williams-Otto. . . . .	33
2.8	Amélioration de l'erreur des prédictions par application de la méthode two-step au réacteur de Williams-Otto. . . . .	33
3.1	Schéma de principe de l'utilisation de RTO-MA pour l'optimisation des procédés en régime permanent. . . . .	39
3.2	Evolution de la fonction coût du procédé avec RTO-MA. . . . .	52
3.3	Evolution de la fonction coût du procédé avec RTO-MA, sur la base des mesures transitoires, avec un modèle approché convexe, $\tau_{RTO} = 60$ min et les gradients idéaux. . . . .	53
3.4	Evolution des contraintes du procédé avec RTO-MA, sur la base des mesures transitoires, avec un modèle approché convexe, $\tau_{RTO} = 60$ min et les gradients idéaux. . . . .	54
3.5	Evolution des entrées avec RTO-MA, sur la base des mesures transitoires, avec un modèle approché convexe, $\tau_{RTO} = 60$ min et les gradients idéaux. . . . .	55
3.6	Evolution de la fonction coût du procédé avec RTO-MA, sur la base des mesures transitoires, avec un modèle approché convexe, $\tau_{RTO} = 1$ min et les gradients idéaux. . . . .	56
3.7	Evolution de la fonction coût du procédé avec RTO-MA, sur la base des mesures transitoires, $\tau_{RTO} = 1$ min et des gradients estimés par NE. . . . .	57

3.8	Evolution des entrées appliquées au procédé avec RTO-MA, sur la base des mesures transitoires, $\tau_{RTO} = 1$ min et des gradients estimés par MU. . . . .	58
3.9	Le cycle vapeur de l'usine de Tridel de 80MW. . . . .	59
3.10	Degrés de liberté du modèle vs. degrés de liberté l'usine de Tridel de 80MW. . . . .	59
3.11	Performances de l'Algorithme 1 (two step) avec (1) les conditions de faisabilité de [29] sont implantées – la convergence prématurée est donc possible, (2) la condition de faisabilité des SCFO est implantée, (3) toutes les SCFO sont implantées, pour deux points initiaux (a) et (b). Les contours de la fonction coût sont représentés par les cercles noirs pointillés, les contraintes <i>du procédé</i> sont tracées en noir, le domaine de faisabilité se distingue par l'utilisation de la couleur verte et le coût optimal pour le procédé est représenté en ponctillés noirs sur les figures de droite. Le point vert figure la solution optimale du procédé. . . . .	66
3.12	Performances de l'Algorithme 2 (random step). . . . .	67
3.13	Méthode A d'ordre 0, modifications des contraintes. . . . .	72
3.14	Méthode B d'ordre 0, modification de l'équation dynamique. . . . .	72
3.15	Profil d'entrée optimaux pour le modèle et pour le procédé réel en pointillés et en trait plein, respectivement. . . . .	75
3.16	Fonction coût vs. numéro de batch. La ligne horizontale en trait mixte indique la valeur optimale pour le procédé réel. . . . .	75
3.17	Concentration de $B$ au temps final vs. numéro de batch. La zone grisée est infaisable. . . . .	76
3.18	RTO run-to-run et génération de trajectoire optimale à suivre pour un procédé discontinu répété. . . . .	77
4.1	Contrôle run-to-run pour l'optimisation dynamique d'un réacteur batch de polymérisation industrielle. . . . .	81
4.2	Profil de températures semi-adiabatiques, adaptés en run-to-run, et viscosités terminales correspondantes. . . . .	81
4.3	Photographie d'un stack SOFC typique . . . . .	85
4.4	Représentation schématique de l'algorithme RTO appliqué au stack SOFC expérimental . . . . .	87
4.5	RTO via contrainte adaptation appliqué toutes les 30 minutes au stack expérimental. . . . .	88
4.6	RTO via contrainte adaptation appliqué toutes les 10 secondes au stack expérimental. . . . .	89
4.7	Choix de coordonnées sphériques (à gauche) et digramme vectoriel illustrant comment est calculé le vent est perçu sur un bateau en déplacement. $V_{wb}$ dénote le vent relatif au bateau, $V_{wind}$ la vitesse du vent et $V_{boat}$ la vitesse du bateau. Clairement $V_{wb} = V_{wind} - V_{boat}$ . . . . .	93
4.8	Trajectoire nominale sur le quart de sphère sur lequel le kite est contraint. Le cercle horizontal bleu figure la contrainte de hauteur . . . . .	94

4.9	Evolution de la traction moyenne le long des cycles (gauche) et de la trajectoire suivie par le kite (droite) . . . . .	95
4.10	2 Photos du prototype de Kite expérimental en cours de construction . . . . .	96
4.11	Application du solver SCFO au réglage itératif d'un contrôleur MPC pour un cristalliseur expérimental . . . . .	97
4.12	MAD (haut) et % en EGA zone A (bas) des valeurs moyennées des prédictions par les différents modèles, pour différents horizons de prédictions par rapport au simulateur UVa. . . . .	106
4.13	MAD (haut) et % EGA en zone A (bas) des prédictions par les différents modèles pour des données cliniques. . . . .	108
C.1	Le prototype de véhicule à pile PEM de Bélénos. . . . .	127

# Introduction

L’optimisation est sans conteste la méthode de choix pour améliorer les performances des procédés chimiques, tout en garantissant le respect des contraintes de production, de qualité, de sécurité et environnementales. La force principale des méthodes d’optimisation et de commande réside dans leur rigueur mathématique. Paradoxalement, cette force a pendant longtemps freiné l’utilisation de ces méthodes dans l’industrie qui a longtemps considéré que, bien qu’intéressantes, l’optimisation et la commande avancée n’étaient applicables qu’aux problèmes de laboratoire ou simulés, i.e. à des problèmes académiques. S’il convient de reconnaître que ce fut longtemps le cas, force est de constater que depuis une vingtaine d’années, l’image de ces méthodes a considérablement évolué, jusqu’à être considérées depuis une dizaine d’années comme des *technologies* [113, 18].

L’optimisation des procédés vise à la détermination des *entrées* qui garantissent le respect des *contraintes* de production tout en minimisant (resp. maximisant) la valeur d’une fonction dite *fonction objectif*, ou *fonction coût*. Ici les entrées sont définies au sens de la théorie des systèmes, et ce ne sont pas nécessairement les alimentations “physiques” d’un procédé mais toute grandeur *manipulable* indépendante qui influence l’état du procédé. Par exemple pour contrôler le niveau d’eau dans un réservoir muni d’un robinet d’alimentation et de fuite, on peut manipuler aussi le bien le débit d’alimentation, auquel cas l’*entrée* est un “entrée physique” du système. On peut aussi manipuler le débit de fuite et dans ce cas l’*entrée* est une sortie physique. Pour optimiser un procédé statique (sans dynamique) ou en régime permanent, comme par exemple un réacteur parfaitement agité à marche continue, à l’état stationnaire, l’utilisation des outils de l’optimisation *statique* s’impose et permet de déterminer les conditions opératoires optimales du réacteur (par ex. la consigne de température, les débits d’alimentation en 1 ou plusieurs des réactifs, etc.). Si l’on désire optimiser les performances d’un procédé dynamique (par ex. minimiser le temps de transition entre deux états stationnaires pour un réacteur parfaitement agité, ou encore optimiser les performances d’un procédé discontinu comme un réacteur semi-batch ou batch), il convient d’utiliser les outils de l’optimisation *dynamique*. C’est bien évidemment une tâche plus compliquée, puisque l’on cherche à présent à déterminer des trajectoires optimales (i.e des signaux de dimension infinie) pour les variables d’entrée (par ex. des profils de température ou d’alimentation).



Le développement au cours des 20 dernières années de codes d'optimisation commerciaux – de plus en plus accessibles pour les non spécialistes – est l'une des raisons principales de la croissance de popularité des méthodes d'optimisation dans l'industrie. Ils sont souvent intégrés ou connectables à des environnements de simulation de procédés qui intègrent des intégrateurs de systèmes dynamiques et des solveurs de systèmes d'équations nonlinéaires puissants et, souvent, des bases de données thermodynamiques et des modules d'opérations unitaires. Ces codes sont de plus en plus performants que par le passé et sont exécutés sur des ordinateurs de plus en plus rapides, et les calculs qui prenaient plusieurs heures lorsque j'effectuais mon DEA en 1998 peuvent être exécutés en quelques minutes. Si les outils ont passablement évolué, si les interfaces sont bien plus accueillantes, la démarche à suivre est restée sensiblement la même. Ainsi, on commence par développer un *modèle du procédé*, à savoir un ensemble d'équations algébriques et/ou différentielles, permettant pour un choix de conditions opératoires (ou pour un choix de trajectoires de commande) de simuler l'état du système auquel on s'intéresse. Les paramètres de ce modèle sont déterminés soit par la connaissance a priori de l'installation ou du procédé (volumes, aires, ...), soit par la connaissance de la littérature (grandeurs thermodynamiques, grandeurs physico-chimiques, ...), soit par identification paramétrique sur la base de mesures expérimentales. Une fois le modèle connu, il convient de formuler le problème d'optimisation et énoncer mathématiquement l'écriture des contraintes et de la fonction à optimiser. Ce n'est qu'à ce stade qu'il est possible d'intégrer le modèle et la formulation du problème à un outil d'optimisation (généralement numérique) afin de procéder à la résolution du problème.

Cependant, même si l'on suppose l'existence de méthodes et d'algorithmes d'optimisation idéaux, performants, fiables et capables de résoudre tout problème donné, les entrées optimales obtenues sont *les entrées optimales du modèle*. Si le modèle dont on dispose est paramétriquement imprécis (si par exemple certains de ses paramètres n'ont pu être identifiés qu'à un intervalle de confiance près) ou structurellement erroné (dans le cas par exemple de dynamiques négligées ou de réactions inconnues), ces entrées n'ont aucune chance d'être optimales pour le procédé réel. C'est malheureusement souvent le cas pour les procédés industriels, et en conséquence, appliquer directement les entrées déterminées par une approche classique d'optimisation basée sur le modèle au procédé réel est quasi-systématiquement sous-optimal. De plus, comme optimiser un procédé correspond souvent à le pousser à évoluer au voisinage des contraintes, les erreurs de modélisation, mais aussi les perturbations, peuvent avoir comme conséquence de conduire à la violation d'une ou plusieurs des contraintes de production. Si on ajoute que plus un modèle est précis et détaillé, plus il est coûteux et plus la résolution (analytique ou numérique) du problème d'optimisation est difficile, l'intérêt des méthodes d'optimisation qui permettent de déterminer *les entrées optimales d'un procédé réel* en garantissant le *respect des contraintes sur le procédé réel* en présence d'incertitude (erreurs de modélisation, perturbations, ...), apparaît clairement.

Ainsi, les trente dernières années ont vu l'émergence du champ thématique de *l'optimisation basée sur les mesures* ou *optimisation en temps réel*. Pour sim-

plifier, toutes les méthodes qui appartiennent à ce champ thématique proposent d'utiliser les mesures disponibles sur le procédé pour corriger, directement ou indirectement, les entrées optimales déterminées sur la base d'un modèle. Elles diffèrent néanmoins sensiblement selon la façon dont elles utilisent les mesures et selon les corrections qu'elles proposent. Historiquement, la première de ces méthodes à avoir reçu un accueil académique et industriel favorable est sans doute l'approche "two-step" pour laquelle les différences entre les mesures du procédé et les prédictions correspondantes par le modèle sont utilisées pour réidentifier le modèle entre deux optimisations successives. Pour autant que l'on puisse identifier les paramètres du modèle avec efficacité, il est possible a priori d'améliorer itérativement les performances du procédé et la qualité de son modèle. Cependant, il est démontré depuis une quinzaine d'années que cette méthode ne n'est généralement pas capable de conduire le procédé aux performances optimales en présence d'erreurs de modélisation structurelles.

En conséquence, des efforts significatifs ont été réalisés pour proposer des alternatives crédibles aux approches two-step. Deux voies principales ont été explorées : la voie des schémas explicites, pour lesquels le problème d'optimisation est itérativement modifié et résolu<sup>1</sup>, et les schémas implicites avec lesquels les entrées sont directement corrigées sur la base des mesures disponibles pour compenser l'effet de l'incertitude, des perturbations et des erreurs de modélisation et guider le procédé réel vers les performances optimales.

Ce rapport, rédigé dans l'idée de rester relativement tutoriel, présente et résume la plupart de mes travaux de recherche, principalement dans le domaine de l'optimisation basée sur les mesures. J'ai eu l'opportunité au cours des 15 dernières années de travailler à la fondation et au développement de deux méthodes :

1. Une méthode implicite, adaptée aux problèmes d'optimisation dynamique. Cette méthode ("NCO-tracking") a été au cœur de mon travail de doctorat.
2. Une famille de méthodes explicites, particulièrement adaptée aux problèmes d'optimisation en régime permanent. Mes contributions dans ce domaine sont toutes postérieures à l'obtention de ma thèse de doctorat.

Dans un premier chapitre, les bénéfices de l'utilisation des méthodes d'optimisation dans l'industrie chimique sont soulignés par la présentation de 4 problèmes industriels typiques, l'approche classique d'optimisation (statique et dynamique) basée sur le modèle est brièvement décrite et la problématique de l'incertitude est discutée. Le deuxième chapitre présente un bref état de l'art dans le domaine de l'optimisation en temps réel. Le chapitre III résume mes travaux et mes résultats de recherche méthodologique et donc mes contributions suivant cet axe de recherche. Le quatrième chapitre présente mes axes principaux de recherche plus appliquée, et résume notamment un certain nombre de résultats dans les domaines de la modélisation, de la commande, et de l'optimisation des

---

1. Notons que les approches two-step appartiennent aux schémas explicites, puisque le problème d'optimisation est modifié – via la correction du modèle – et résolu itérativement

systèmes chimiques, énergétiques et de bio-ingénierie. Ce dernier axe, qui correspond à l'encadrement d'une thèse de doctorat dans le domaine du traitement automatisé du diabète, peut sembler un peu à part de ma ligne principale de recherche, plus focalisée sur l'optimisation et la commande des procédés. Il présente néanmoins plusieurs points communs, notamment l'omniprésence de l'incertitude et des erreurs de modélisation. Le dernier chapitre, qui conclut ce rapport et présente plusieurs perspectives et pistes de recherche pour le futur, est suivi par des annexes résumant notamment mes activités de recherche, d'enseignement, d'encadrement, mes activités administratives et de valorisation. La liste de mes publications, les références et quelques publications significatives concluent ce mémoire.

# Chapitre 1

## Optimisation des procédés chimiques

### 1.1 Introduction

L'industrie chimique est un secteur fortement concurrentiel. Tout outil, toute méthode, toute approche qui permette de réduire les coûts de production et par conséquent augmenter les bénéfices est donc particulièrement appréciable. La structure même de l'industrie chimique s'est adaptée à la globalisation et a progressivement évolué, notamment en Europe, au cours des trente dernières années. A l'origine dominé par la fabrication de composés chimiques de base, le marché est à présent bien plus segmenté incluant toujours le produits de base, mais intégrant aussi certains produits de consommation, des produits de spécialité voire même des produits inspirés ou fabriqués tout ou partie au moyen des sciences du vivant. Si ces changements ont impacté l'organisation structurale de nombreuses entreprises, il ont aussi conduit à de profonds changements de nature et de capacité des sites de production. En conséquence, les critères d'évaluation des performances ne sont plus mêmes que par le passé [15].

Malgré l'évolution et la segmentation du marché, deux tendances principales se distinguent toujours. Les produits de base sont typiquement produits en continu dans des réacteurs de grand volume et le profit est généré par la propogation d'une faible marge sur des volumes importants. A contrario, les produits de spécialité et les produits de performances sont souvent produits de manière discontinue, dans des réacteurs batchs de volume modéré. Dans un cas comme dans l'autre, l'application de méthodes d'optimisation des procédés permet d'améliorer des critères clefs, comme la qualité et l'efficacité de production, dans un marché pesant plus de 1600 milliards US\$ par an.

## 1.2 Optimisation statique basée sur un modèle

### 1.2.1 Formulation du problème

Optimiser un procédé, c'est avoir comme objectif l'amélioration de ses performances opératoires. En plus de la minimisation d'une fonction coût, il est généralement nécessaire de satisfaire un certain nombre de contraintes de production. Pour un procédé en régime permanent, tout ceci peut être formulé mathématiquement comme un programme nonlinéaire (NLP) :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_p^* &:= \arg \min_{\mathbf{u}} \phi_p(\mathbf{u}) \\ \text{s.t. } & \mathbf{G}_p(\mathbf{u}) \leq \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (1.1)$$

où  $\mathbf{u}$  est le vecteur des entrées de dimension  $n_u$ ,  $\mathbf{G}_p$  est le vecteur des  $n_G$  contraintes du procédé et  $\phi_p(\mathbf{u})$  est la fonction coût à valeurs réelles. Dans ce manuscrit l'indice  $(\cdot)_p$  indique toute quantité reliée au procédé.

Cette formulation incorpore plusieurs problèmes typiques :

1. les problèmes statiques,
2. les problèmes d'optimisation en régime établi (pour lesquels la fonction coût et les contraintes sont définies au régime permanent d'un procédé dynamique),
3. les problèmes d'optimisation dynamique, reformulés comme des NLP, en utilisant, par exemple, l'approche simultanée [8], à savoir en paramétrant les variables d'entrée et d'état du système,
4. l'optimisation dynamique "run-to-run" pour laquelle seules les profils d'entrée sont paramétrés (avec un nombre fini de paramètres) et pour laquelle la fonction coût et les contraintes sont définies au temps final de l'opération discontinue. Dans ce cas, comme : (i) les paramètres d'entrée sont choisis au début du batch et (ii) les coût et les contraintes sont définies au temps final, la dynamique est implicitement représentée dans un mapping nonlinéaire [70], de façon similaire à l'approche directe séquentielle en optimisation dynamique [121].

Dans la pratique, les fonctions  $\phi_p$  and  $\mathbf{G}_p$  ne sont pas directement connues, et un modèle du procédé est utilisé, ce qui conduit au NLP suivant :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^* &:= \arg \min_{\mathbf{u}} \varphi(\mathbf{u}, \bar{\mathbf{y}}, \boldsymbol{\theta}) \\ \text{s.t. } & \dot{\bar{\mathbf{x}}} = \mathbf{F}(\mathbf{u}, \bar{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\theta}) = \mathbf{0} \\ & \bar{\mathbf{y}} = \mathbf{h}(\mathbf{u}, \bar{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\theta}) \\ & \mathbf{g}(\mathbf{u}, \bar{\mathbf{y}}, \boldsymbol{\theta}) \leq \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (1.2)$$

o  $\varphi$  représente le modèle de la fonction coût,  $\mathbf{F}$  le vecteur colonne de dimension  $n$  représentant le modèle dynamique,  $\mathbf{g}$  le vecteur colonne de dimension  $n_G$  des contraintes,  $\bar{\mathbf{x}}$  le vecteur colonne de dimension  $n$  des états du système en

régime stationnaire,  $\bar{\mathbf{y}}$  le vecteur colonne de dimension  $p$  des sorties en régime stationnaire,  $\boldsymbol{\theta}$  le vecteur colonne de dimension  $q$  de paramètres du modèle. Sans perte de généralité et pour éviter d'alourdir les notations, l'existence de la fonction explicite  $\bar{\mathbf{y}} = \mathbf{H}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\theta})$  est supposée, ce qui permet de reformuler le problème (1.3) comme suit :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^* &:= \arg \min_{\mathbf{u}} \phi(\mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) \\ \text{s.t. } &\mathbf{G}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) \leq \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (1.3)$$

où  $\phi$  et  $\mathbf{G}$  représentent les modèles du coût et des contraintes, respectivement et sont supposées deux fois différentiables.

### 1.2.2 Conditions d'optimalité

Les conditions nécessaires d'optimalité (NCO), ou conditions de Karush-Kuhn-Tucker (KKT), pour le problème 1.3 basé sur le modèle, s'écrivent [5] :

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\mathbf{u}^*, \boldsymbol{\theta}) &\leq \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\nu}^* \geq \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\nu}^{*T} \mathbf{G}(\mathbf{u}^*, \boldsymbol{\theta}) = \mathbf{0} \\ \nabla_{\mathbf{u}} \phi(\mathbf{u}^*, \boldsymbol{\theta}) + \boldsymbol{\nu}^{*T} \nabla_{\mathbf{u}} \mathbf{G}(\mathbf{u}^*, \boldsymbol{\theta}) &= \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (1.4)$$

, avec  $\mathbf{u}^*$  qui dénote la solution du problème 1.3 basé sur le modèle et  $\boldsymbol{\nu}$  le vecteur de dimension  $n_G$  de multiplicateurs de Lagrange associés aux contraintes  $\mathbf{G}$ . Ce sont des conditions nécessaires, qui peuvent permettre de caractériser analytiquement  $\mathbf{u}^*$ , dans le cas où  $\mathbf{u}^*$  est non seulement un minimum (local), mais aussi *un point régulier pour les contraintes*.

L'hypothèse de régularité est une hypothèse classique en optimisation numérique et non restrictive. Elle peut être vérifiée si les contraintes actives<sup>1</sup> sont linéairement indépendantes au voisinage de  $\mathbf{u}^*$ . La deuxième ligne de l'équation 1.4 est intéressante en ce qu'elle indique qu'au voisinage de la solution les gradients de la fonction coût et des contraintes sont nécessairement colinéaires et d'orientation opposée. Géométriquement, cela signifie qu'il est impossible de trouver une direction au voisinage de la solution  $\mathbf{u}^*$  qui permette de diminuer la fonction coût et les contraintes simultanément. En effet l'existence d'une telle direction disqualifierait  $\mathbf{u}^*$  comme solution optimale, puisqu'en se déplaçant le long de cette direction il serait possible de trouver un autre  $\mathbf{u}$  pour lequel la fonction coût est plus petite et les contraintes satisfaites.

---

1. La condition de faisabilité  $\mathbf{G}(\mathbf{u}^*, \boldsymbol{\theta}) \leq \mathbf{0}$  indique que toutes les contraintes sont bien satisfaites en  $\mathbf{u}^*$ . On peut cependant distinguer deux types de contraintes : les contraintes actives à l'optimum notées  $\mathbf{G}_a$  telles que  $\mathbf{G}_a(\mathbf{u}^*, \boldsymbol{\theta}) = \mathbf{0}$ . et les contraintes inactives telles que  $\mathbf{G}_i(\mathbf{u}^*, \boldsymbol{\theta}) < \mathbf{0}$ . Pour que  $\boldsymbol{\nu}^{*T} \mathbf{G}(\mathbf{u}^*, \boldsymbol{\theta}) = 0$ , il est bien sûr nécessaire que les multiplicateurs de Lagrange associés aux contraintes inactives soient nuls. Par contre, les multiplicateurs associés aux contraintes actives peuvent être positifs ou nuls, ce qui permet de distinguer de nouveau les contraintes dites fortement actives notées  $\mathbf{G}_{s,a}$  dont les multiplicateurs de Lagrange  $\boldsymbol{\nu}^{s,a}$  sont strictement positifs et les contraintes faiblement actives notées  $\mathbf{G}_{w,a}$ , aux multiplicateurs nuls.

De la même façon les conditions d'optimalité pour le procédé s'écrivent :

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_p(\mathbf{u}_p^*, \boldsymbol{\theta}) &\leq \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\nu}_p^* \geq \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\nu}_p^{*T} \mathbf{G}_p(\mathbf{u}_p^*) = \mathbf{0} \\ \nabla_{\mathbf{u}} \phi_p(\mathbf{u}_p^*) + \boldsymbol{\nu}_p^{*T} \nabla_{\mathbf{u}} \mathbf{G}_p(\mathbf{u}_p^*) &= \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (1.5)$$

, avec  $\mathbf{u}_p^*$  qui dénote la solution du problème 1.1 pour le procédé.

Si le modèle est une représentation idéale de la réalité, alors les problèmes d'optimisation (1.3) et (1.1) et les NCOs (1.4) et (1.5) sont équivalentes et l'on obtient  $\mathbf{u}^* = \mathbf{u}_p^*$ .

## 1.3 Optimisation dynamique basée sur un modèle

### 1.3.1 Formulation

Dans le cas de procédés discontinus, comme les réacteurs batchs, la formulation générale d'un problème d'optimisation dynamique au temps final s'écrit :

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{u}(t), \boldsymbol{\rho}} \quad & J := \phi_p(\mathbf{x}_p(t_f), \boldsymbol{\rho}) \\ \text{s.t.} \quad & \dot{\mathbf{x}}_p = \mathbf{F}_p(\mathbf{u}(t), \mathbf{x}_p(t), \boldsymbol{\rho}) \quad \mathbf{x}_p(0) = \mathbf{x}_{p0} \\ & \mathbf{S}_p(\mathbf{u}(t), \mathbf{x}_p(t), \boldsymbol{\rho}) \leq \mathbf{0} \\ & \mathbf{T}_p(\mathbf{x}_p(t_f), \boldsymbol{\rho}) \leq \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (1.6)$$

où  $\phi_p$  est la fonctionnelle à valeurs réelles au temps final  $t_f$ ,  $\mathbf{u}$  le vecteur de dimension  $n_u$  des profils temporels des variables de commande,  $\mathbf{x}_p$  le vecteur de dimension  $n$  des profils temporels des variables d'état de valeurs initiales  $\mathbf{x}_{p0}$  connues,  $\boldsymbol{\rho}$  le vecteur de dimension  $n_p$  incorporant tous les paramètres de décision (degrés de libertés fixes dans le temps),  $\mathbf{S}_p$  le vecteur de dimension  $n_S$  des contraintes de chemin (à satisfaire en tout temps  $t$ ),  $\mathbf{T}_p$  le vecteur de dimension  $n_T$  des contraintes dites "terminales" (à satisfaire en  $t = t_f$ ) et  $t_f$  le temps final. Notons que le temps final peut être fixé a priori, ou libre (auquel cas il appartient au vecteur  $\boldsymbol{\rho}$ ).

Le problème (1.6) est volontairement présenté dans la forme de *Mayer*, à savoir avec un coût terminal. Il est aussi possible de définir  $\phi_p$  comme un coût intégral (forme de *Lagrange*), ou encore comme la somme d'un coût terminal et d'un coût intégral. Ces trois formes sont équivalentes, et il est aisé de passer de l'une à l'autre en introduisant des états supplémentaires.

Similairement aux problèmes statiques, la résolution du problème (1.6) s'appuie sur la construction et la connaissance d'un modèle dynamique du procédé. Si le modèle dynamique  $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{F}(\mathbf{u}(t), \mathbf{x}(t), \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\theta})$  est connu, pour lequel  $\mathbf{x}$  représente les états modélisés et pour un jeu de paramètres du modèle  $\boldsymbol{\theta}$ , on formule donc classiquement le problème dynamique basé sur le modèle :

$$\begin{aligned}
\min_{\mathbf{u}(t), \boldsymbol{\rho}} \quad & J := \phi(\mathbf{x}(\mathbf{t}_f)), \boldsymbol{\rho} \\
\text{s.t.} \quad & \dot{\mathbf{x}} = \mathbf{F}(\mathbf{u}(t), \mathbf{x}(t)), \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\theta} \quad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \\
& \mathbf{S}(\mathbf{u}(t), \mathbf{x}(t)), \boldsymbol{\rho} \leq \mathbf{0} \\
& \mathbf{T}(\mathbf{x}(\mathbf{t}_f)), \boldsymbol{\rho} \leq \mathbf{0},
\end{aligned} \tag{1.7}$$

### 1.3.2 Principe du Maximum

Similairement au cas statique, les profils de commande optimaux sont caractérisés analytiquement par un ensemble de conditions nécessaires d'optimalité. Une expression de ces conditions s'obtient par application du principe du Maximum de Pontryaguin, qui nécessite l'introduction du Hamiltonien  $H(t)$ , du coût terminal augmenté  $\Phi(t_f)$  et du coût terminal total  $\Psi(t_f)$  :

$$H(t) = \boldsymbol{\lambda}^T(t) \mathbf{F}(\mathbf{u}(t), \mathbf{x}(t)), \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\mu}^T(t) \mathbf{S}(\mathbf{u}(t), \mathbf{x}(t)), \boldsymbol{\rho}) \tag{1.8}$$

$$\Phi(t_f) = \phi(\mathbf{x}(\mathbf{t}_f)), \boldsymbol{\rho} + \boldsymbol{\nu}^T \mathbf{T}(\mathbf{x}(\mathbf{t}_f)), \boldsymbol{\rho} \tag{1.9}$$

$$\Psi(t_f) = \Phi(t_f) + \int_0^{t_f} H(t) dt \tag{1.10}$$

avec les variables adjointes  $\boldsymbol{\lambda}(t)$  telles que :

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}^T(t) = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}}(t) \tag{1.11}$$

$$\boldsymbol{\lambda}^T(t_f) = \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{x}}(t_f) \tag{1.12}$$

et  $\boldsymbol{\mu}(t) \geq \mathbf{0}$  et  $\boldsymbol{\nu} \geq \mathbf{0}$  les multiplicateurs de Lagrange associées aux contraintes de chemin  $\mathbf{S}$  et terminales  $\mathbf{T}$ , respectivement.

Avec ces notations, les conditions d'optimalité pour le modèle s'écrivent [119] :

	Chemin	Terminales
Contraintes	$\boldsymbol{\nu}^T \mathbf{S} = 0, \boldsymbol{\nu} \geq \mathbf{0}$	$\boldsymbol{\mu}^T \mathbf{T} = 0, \boldsymbol{\mu} \geq \mathbf{0}$
Sensibilités	$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} = \mathbf{0}$	$\frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\rho}}$

TABLE 1.1 – Conditions nécessaires d'optimalité pour un problème d'optimisation dynamique

Comme pour le cas des procédés statiques ou en régime permanent, les NCOs du problème d'optimisation du procédé s'obtiennent en ajoutant l'indice "p" aux contraintes, aux multiplicateurs de Lagrange, au Hamiltonien et au coût terminal total dans le tableau 1.1. Idéalement le modèle dynamique du procédé, les paramètres et les écritures fonctionnelles du coût et des contraintes du modèle sont des représentations parfaites du procédé et l'on obtient en résolvant le problème basé sur le modèle (1.7), la solution du problème d'optimisation dynamique du procédé (1.6), i.e.  $\mathbf{u}^*(t) = \mathbf{u}_p^*(t)$  et  $\boldsymbol{\rho}^* = \boldsymbol{\rho}_p^*$ .



## 1.4 4 Problèmes classiques d’optimisation en génie des procédés chimiques

Dans cette section, sont discutées quatre problématiques industrielles appliquées pour lesquelles l’utilisation des outils de l’optimisation, statique ou dynamique, est appropriée. La présentation de ces problématiques a pour vocation d’éclairer le lecteur sur l’utilisation des techniques d’optimisation, au-delà de la formulation mathématique parfois obscure pour un non-spécialiste, dans le contexte de l’industrie chimique [63].

### 1.4.1 Optimisation en régime permanent des réacteurs continus

Pour une unité de production chimique continue (ou un ensemble d’unités continues), la performance optimale est atteinte lorsque la ou les unités opèrent au voisinage de valeurs de consigne optimales - généralement implantées en pratique au moyen de contrôleurs de bas niveau. Ce sont généralement des valeurs de consigne pour des débits d’alimentation, pour des températures de consigne, pour des quantités d’énergie à fournir au bouilleur d’une colonne à distiller, ou encore pour des taux de recyclage, ...

Ces valeurs de consigne peuvent être déterminées par l’optimisation statique sous contraintes. La formulation du problème incorpore donc typiquement le critère de performance et les objectifs de production qui dépendent de l’état du marché et des commandes, et sont fixés au niveau de la planification de la production. Il est donc nécessaire de disposer d’un modèle de l’unité ou de l’usine entière et procéder à une réoptimisation périodique, pour tenir compte des fluctuations du marché et ajuster régulièrement ces valeurs de consigne.

### 1.4.2 “Scaling-Up” de l’échelle du laboratoire à l’échelle industrielle

Le “scaling-up” est un problème récurrent dans l’industrie. Il consiste à mettre à l’échelle industrielle une recette qui a été déterminée dans un réacteur de laboratoire. Typiquement, cette recette, déterminée pour un réacteur d’essai, consiste en un jeu de conditions opératoires constantes pour les réacteurs continus parfaitement agités en régime permanent, ou en un jeu de profils temporels dans le cas des procédés discontinus (batch) ou semi-continus (semi- ou fed-batch). Notons à ce propos que pour déterminer la recette de départ, l’optimisation statique (resp. dynamique) peut être utilisée si l’on dispose d’un modèle de l’unité continue (resp. discontinue).

Cependant, si la recette a bien été optimisée pour le réacteur de laboratoire, cette propriété d’optimalité ne va pas être vérifiée pour le réacteur industriel et la recette se doit donc d’être corrigée. Ainsi, un profil de température optimal pour un réacteur de laboratoire d’un litre, déterminé avec les outils de l’optimisation dynamique, en tenant compte d’une contrainte de dissipation d’énergie

produite, n'a que peu de chances d'être optimal pour un réacteur d'une tonne aux propriétés de mélange et d'échange de chaleur bien différentes. Une solution peut être de réaliser une étape supplémentaire et de mettre en œuvre un réacteur pilote de taille intermédiaire pour y effectuer la plupart des ajustements de la recette. Cependant la tendance est, notamment pour les entreprises de taille petite à moyenne, d'essayer de contourner l'étape du pilote, pour directement passer à la production industrielle – et ce pour d'évidentes raisons économiques.

L'optimisation basée sur le modèle peut être envisagée pour réaliser ce scale-up, pour autant que l'on puisse, par exemple, adapter le modèle du réacteur de laboratoire à la réalité industrielle. A l'image de la détermination de la recette de laboratoire, les méthodes d'optimisation statiques seront plus adaptées à la mise à l'échelle des recettes pour les réacteurs continus en régime permanent, tandis que les méthodes dynamiques seront privilégiées pour l'adaptation des recettes pour les réacteurs discontinus. Cependant, il est aussi possible d'utiliser le formalisme de l'optimisation statique pour l'adaptation de recettes dynamique en "run-to-run" (voir Section 1.4.4).

### 1.4.3 Changement de grade de réacteurs continus en régime permanent

Un réacteur continu en régime permanent peut être vu comme un système statique, i.e. un mapping entre les conditions opératoires et les grandeurs mesurées du procédé. Cependant, un réacteur continu reste un système dynamique, et chaque changement de consigne opératoire ou chaque perturbation donne lieu à une phase transitoire, généralement entre deux états d'équilibre.

À titre d'exemple considérons le scénario suivant : une usine fabrique un produit A en continu et est stabilisée au voisinage des conditions opératoires optimales de production de A. Pour des raisons économiques il est décidé de procéder à une campagne de production d'un produit voisin, noté B. Il faut donc quitter la fenêtre opératoire de production de A et guider et stabiliser l'usine autour des conditions opératoires (idéalement optimales) de production de B.

En pratique on désire en plus réaliser cette transition de façon optimale (par exemple en temps minimal) puisque pendant cette phase, de la matière première, de l'énergie et du temps de travail sont consommés alors ni A, ni B ne sont produits. C'est d'autant plus important pour les usines procédant à des changements de grade fréquents sur une ou plusieurs lignes pour produire un grand nombre de grades différents - c'est à dire pour des entreprises produisant des produits de spécialité, présentant une forte réactivité au marché.

Si l'objectif est de stabiliser la chaîne de production autour des conditions opératoires optimales de production de B - déterminées typiquement par l'optimisation statique basée sur le modèle, le problème d'optimisation de la transition s'écrit naturellement comme un problème d'optimisation dynamique, puisque pendant une phase de transition, le réacteur continu est un mode dynamique.

#### 1.4.4 Optimisation dynamique run-to-run

Beaucoup de procédés batchs et semi-batchs sont répétés dans le temps, au cours, par exemple, de campagnes de production. Lorsque c’est le cas, il est possible d’utiliser les observations des batchs précédents pour améliorer les performances du ou des batchs à venir. Cette approche est connue dans la littérature comme l’optimisation “run-to-run” ou “batch-to-batch”, et est en fait une approche qui systématise ce que font de nombreux opérateurs et ingénieurs procédés de façon heuristique.

Il est intéressant de noter que le formalisme de l’optimisation statique peut être utilisé même si le réacteur est discontinu. Pour cela, il est nécessaire de représenter le profil de commande optimal par un nombre fini de paramètres scalaires. Dans ce cas, le procédé peut être vu comme un mapping statique, nonlinéaire entre ces paramètres (fixés au début du batch) et les performances et contraintes mesurées en fin de batch. L’adaptation itérative des profils de commande optimaux, i.e. l’optimisation run-to-run sera dans ce cas réalisée au travers de l’adaptation itérative des paramètres représentatifs des profils optimaux. Ainsi l’optimisation dynamique run-to-run se résoud typiquement comme une séquence de problèmes d’optimisation statique ou par une adaptation directe des paramètres d’entrée, par exemple au moyen d’une loi de commande optimisante. C’est dans cette thématique que j’ai réalisé mon travail de doctorat [73, 70, 63].

### 1.5 La problématique de l’incertitude

Dans les sections précédentes, les problèmes d’optimisation relatifs aux procédés et aux modèles correspondants ont volontairement été distingués par la présence (resp. l’absence) de l’indice  $p$ . L’idée est de montrer clairement que contrairement aux problèmes d’optimisation numérique pure, l’optimisation des procédés a la particularité de traiter le cas complexe pour lequel le modèle n’est pas toujours, loin s’en faut, une image fidèle de la réalité expérimentale ou industrielle. C’est, entre autres, cette incertitude sur la précision du modèle et la présence de perturbations qui affectent le procédé qui rendent l’optimisation des procédés chimiques industriels si difficile. En effet, contrairement au cas des systèmes mécaniques ou électriques où les modèles sont souvent de bonne qualité, disposer de bons modèles précis et détaillés de systèmes chimiques et biochimiques industriels est coûteux et donc rare.

“L’incertitude” est une notion vague qui (comme les systèmes nonlinéaires) est définie par tautologie. En effet l’incertitude incorpore tout ce qui est inconnu et/ou qui n’est pas connu avec certitude : défauts structurels dans le modèle (“plant-model mismatch”), erreurs paramétriques et perturbations (à l’image des systèmes nonlinéaires caractérisés par l’absence d’applicabilité du principe de superposition).

Mathématiquement, les erreurs structurelles se traduisent par des différences fonctionnelles entre les expressions de  $\phi_p$  et  $\phi$  et entre les expressions de  $\mathbf{G}_p$  et

$\mathbf{G}$  pour les problèmes 1.1 et 1.3. Similairement pour les problèmes d'optimisation dynamique, les erreurs structurelles seront vraisemblablement présentes dans l'expression du modèle dynamique (entre  $\mathbf{F}$  et  $\mathbf{F}_p$ ), mais peuvent aussi être présentes dans les expressions mathématiques de la fonction coût et des contraintes, qu'elles soient de chemin ou terminales.

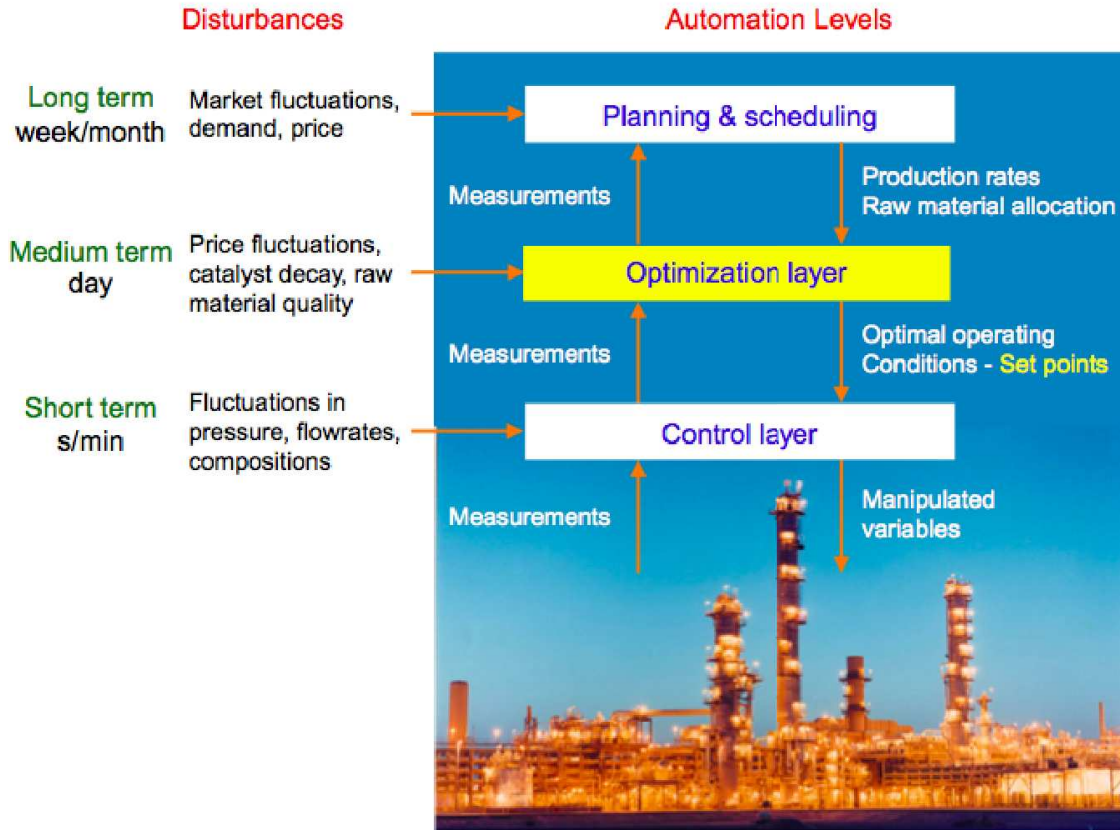


FIGURE 1.1 – Perturbations affectant les différents niveaux de l'architecture de contrôle des procédés [63].

Les erreurs paramétriques peuvent être présentes dans tout modèle, qu'il soit structurellement correct ou non. Elles sont typiquement causées par les difficultés inhérentes aux problèmes d'identification (nombre de mesures indépendantes disponibles, richesse du signal d'excitation qui a été utilisé, ...). Dans le cas d'un modèle structurellement correct paramétriquement incertain, les expressions fonctionnelles de  $\phi_p$  et de  $\phi$ , par exemple, sont identiques mais dépendent de paramètres différents. En d'autres termes  $\phi_p(\mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) = \phi(\mathbf{u}, \boldsymbol{\theta})$  et la différence vient de ce que  $\phi_p$  dépend en réalité de  $\boldsymbol{\theta}_p$  alors que le modèle considère  $\boldsymbol{\theta}$  et

que  $\theta_p \neq \theta$ .

En résumé, on considère dans ce document que l’incertitude pour les procédés chimiques correspond aux cas où :

1. aucun modèle du procédé n’est disponible. Il est néanmoins possible d’optimiser le fonctionnement du procédé par des méthodes purement expérimentales, c’est à dire en “parcourant” l’espace des commandes admissibles,
2. un modèle structurellement correct mais paramétriquement incorrect est disponible,
3. un modèle structurellement et paramétriquement incorrect est disponible,
4. durant l’opération, des perturbations affectent le procédé, perturbations pouvant modifier par exemple la valeur de paramètres opératoires et donc éventuellement transformer un modèle paramétriquement (voire structurellement) correct en un modèle incorrect.

Comme l’incertitude incorpore toutes les erreurs structurelles entre le procédé et son modèle, toutes les imprécisions potentielles dans l’estimation des paramètres du modèle et les perturbations, elle affecte tous les niveaux de l’architecture classique de commande et d’optimisation des procédés chimiques, comme illustré par la Figure 1.1.

Comme observé dans la figure 1.1, les perturbations les plus lentes sont typiquement les variations du marché et sont contre-balancées par les décisions prises au niveau stratégique de la planification. Similairement, les perturbations rapides affectent le procédé directement, et c’est le rôle des contrôleurs en ligne de les rejeter.

L’optimisation est généralement la couche de décision intermédiaire, où sont calculées les valeurs de consigne des contrôleurs de bas niveau pour stabiliser le procédé au point de fonctionnement optimal qui correspond aux choix de production - définis par la planification. L’optimisation peut donc être réalisée périodiquement, à une plus haute fréquence que la planification, mais, bien évidemment plus lentement que le contrôle. L’utilisation de mesures à ce niveau permet donc de rejeter les perturbations de moyenne fréquence, tout en propageant les décisions prises au niveau de la planification, en tenant compte des mesures disponibles sur le procédé. C’est l’idée principale derrière les méthodes d’optimisation en temps réel (ou optimisation basée sur les mesures, optimisation expérimentale, ...), qui – au cœur de mes activités de recherche – sont présentées dans le chapitre suivant.

## Chapitre 2

# Optimisation en temps réel (RTO)

### 2.1 Etat de l’art

#### 2.1.1 Classification des méthodes de RTO

La philosophie des méthodes d’optimisation basée sur les mesures (MBO), ou d’optimisation en temps réel (RTO) est d’utiliser les mesures disponibles sur le procédé pour compenser l’effet de l’incertitude. L’objectif est de corriger directement ou indirectement, les entrées optimales pour le modèle et d’obtenir les entrées optimales du procédé. Si toutes les méthodes de RTO partagent cette philosophie, elles se distinguent selon la façon dont les mesures sont incorporées au niveau du problème d’optimisation.

Il est donc possible de classer les méthodes de RTO en fonction de la façon dont les mesures sont utilisées :

- Les méthodes directes (aussi labélisées “implicites”), pour lesquelles le problème d’optimisation est reformulé comme un problème de contrôle et qui propose ainsi une correction directe des entrées (tout en résolvant implicitement le problème d’optimisation pour le procédé),
- Les méthodes indirectes, pour lesquelles l’adaptation des entrées passe par une étape de ré-optimisation. Ces méthodes sont aussi labélisées “méthodes explicites”, puisque l’on résout explicitement le problème d’optimisation, généralement de manière itérative. Ces méthodes peuvent de plus être distinguées suivant la façon dont la rétroaction est utilisée pour :
  1. *adapter (corriger) le modèle du procédé sur la base de la déviation entre les grandeurs mesurées et les prédictions correspondantes.* L’adaptation des entrées est donc obtenue en résolvant itérativement le même problème d’optimisation, mais avec un modèle adapté à chaque itération, jusqu’à la convergence.
  2. *adapter la formulation mathématique du problème d’optimisation.*

L'adaptation des entrées est donc obtenue en résolvant itérativement un problème d'optimisation modifié à chaque itération, pour le même modèle du procédé, jusqu'à la convergence.

Cette première classification est représentée schématiquement dans la Figure 2.1.

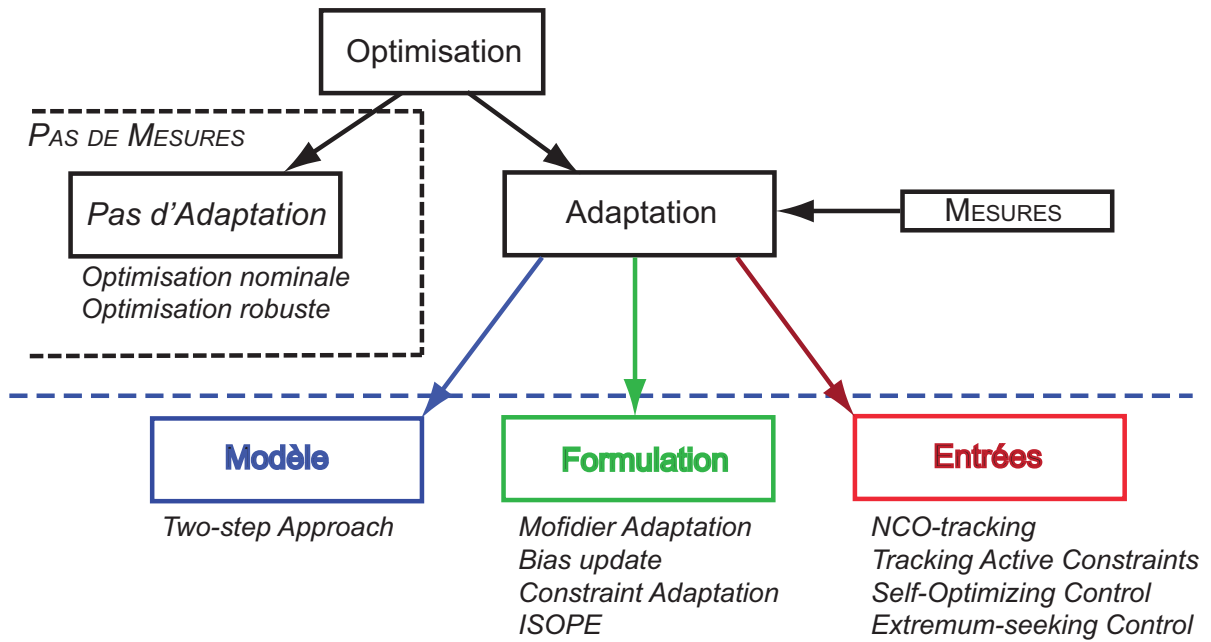


FIGURE 2.1 – Classification des schémas RTO - ISOPE signifie : “Integrated System Optimization and Parameter Estimation”

Ainsi un certain nombre de méthodes et techniques de RTO sont disponibles dans la littérature qui s’inscrivent dans cette classification :

- Les approches “two-step”, avec à chaque itération identification paramétrique et ré-optimisation [88, 32, 54, 102],
- Les approches pour lesquelles le modèle est gardé fixe, tandis que le problème d’optimisation est modifié par le moyen de biais sur les fonctions coût et contraintes [112, 19, 75, 126, 96, 64],
- Les méthodes directes, qui souvent essaient d’estimer les gradients des fonctions coût et/ou des contraintes [17, 76, 70, 91, 27], proches dans l’esprit des méthodes de contrôle de gradient.

Les méthodes purement expérimentales, i.e. qui n’utilisent que les mesures disponibles pour localiser l’optimum du procédé, à l’exclusion donc de tout modèle phénoménologique, font aussi partie des familles des méthodes de RTO et peuvent être distinguées comme suit :

- les méthodes à modèles de surfaces de réponses, inspirées des plans d’expériences [77, 101], où un modèle – généralement quadratique – est construit sur la

base des données expérimentales et optimisé. Les entrées optimales sont ensuite implantées qui permettent d'améliorer le modèle quadratique. Ce sont donc, dans l'esprit, des méthodes de type "two-step" à ceci près qu'on ne résoud pas un problème d'identification paramétrique dans le but d'améliorer un modèle phénoménologique "global" mais un modèle purement paramétrique "local".

- les méthodes "derivative-free" qui contournent le problème d'estimation des gradients [16, 1, 82, 34]. Selon la méthode choisie, ces approches peuvent souvent être rapprochées des méthodes directes.

### 2.1.2 Les approches "Two-Step"

Il s'agit ici d'affiner le modèle entre chaque réoptimisation en utilisant typiquement la distance euclidienne entre les sorties prédites et les sorties mesurées comme critère d'optimisation d'un problème d'identification (dont les paramètres du modèle réputés incertains sont les degrés de liberté).

#### Formulation

Par souci de simplicité, l'approche two-step est présentée ici dans sa version itérative pour des problèmes d'optimisation statique ou en régime permanent. Il est aussi possible, quoique plus difficile en pratique, de formuler cette approche pour qu'elle soit applicable aux systèmes dynamiques incertains. Dans sa version originale [99, 130], l'approche "two-step" suit la séquence suivante :

1. Appliquer les entrées nominales  $\mathbf{u}_k^*$ ,
2. Attendre l'atteinte du régime permanent et calculer la distance entre sortie prédites et sorties mesurées en régime permanent,
3. Si la distance est supérieure à la tolérance, aller en 4, sinon stop,
4. Résoudre le problème d'indentification paramétrique pour déterminer  $\boldsymbol{\theta}_k^*$ ,
5. Résoudre le problème d'optimisation avec le modèle adapté pour obtenir  $\mathbf{u}_{k+1}^*$ ,
6.  $k := k + 1$ , et aller en 1

Cet algorithme est illustré par la Figure 2.2.

Mathématiquement on peut formuler ce double problème comme suit :

$$\begin{aligned} \text{Identification : } \quad \boldsymbol{\theta}_k^* &:= \arg \min_{\boldsymbol{\theta}} (||\mathbf{y}_p(\mathbf{u}_k^*) - \mathbf{y}(\mathbf{u}_k^*, \boldsymbol{\theta}_{k-1}^*)||) \\ \text{s.t.} \quad &\boldsymbol{\theta} \in \boldsymbol{\Theta}, \end{aligned} \tag{2.1}$$

$$\begin{aligned} \text{Optimisation : } \quad \mathbf{u}_{k+1}^* &:= \arg \min_{\mathbf{u}} \phi(\mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}_k^*) \\ \text{s.t.} \quad &\mathbf{G}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}_k^*) \leq \mathbf{0}, \end{aligned} \tag{2.2}$$

Avec  $\boldsymbol{\Theta}$  qui représente l'ensemble des valeurs admissibles des paramètres incertains  $\boldsymbol{\theta}$ .



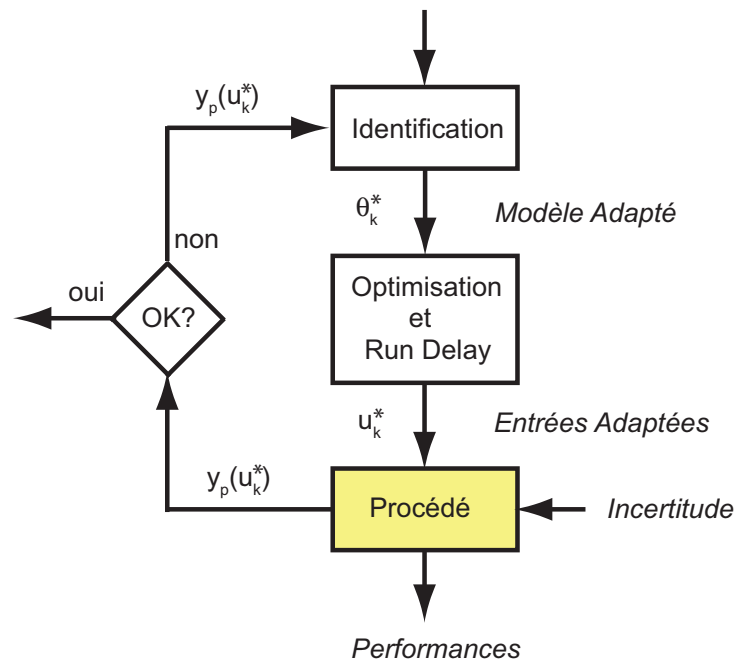


FIGURE 2.2 – Principe des méthodes two-step.

### “Model adequacy”

L’approche “two-step” décrite dans la section précédente connaît le succès depuis plus de trente ans, notamment dans l’industrie. C’est en effet une méthode intuitive, compréhensible et qui a le grand avantage de proposer (quand elle fonctionne) une amélioration simultanée des performances du procédé et de son modèle.

Cependant il a été prouvé que cette approche n’a virtuellement aucune chance de converger aux entrées optimales du procédé lorsque l’incertitude est structurelle [61], auquel cas la fonction objectif du problème d’identification peut être complètement disjointe du problème d’optimisation. Dans ce cas, minimiser la distance entre sorties prédites et sorties mesurées n’aide pas à déterminer les conditions opératoires optimales du procédé réel.

Pour que l’approche two-step conduise aux entrées optimales (inconnues) du procédé  $u_p^*$ , il est indispensable que les conditions suffisantes de deuxième ordre pour le “double” problème d’identification et d’optimisation des équations (2.1-

2.2) soient satisfaites pour les paramètres  $\bar{\theta}$  obtenus à convergence. Ainsi :

$$\frac{\partial J^{id}}{\partial \theta} (\mathbf{y}_p(\mathbf{u}_p^*), \mathbf{y}(\mathbf{u}_p^*, \bar{\theta})) = \mathbf{0} \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial^2 J^{id}}{\partial \theta^2} (\mathbf{y}_p(\mathbf{u}_p^*), \mathbf{y}(\mathbf{u}_p^*, \bar{\theta})) \geq \mathbf{0} \quad (2.4)$$

$$G_i(\mathbf{u}_p^*, \bar{\theta}) = 0 \quad i \in \mathcal{A}(\mathbf{u}_p^*) \quad (2.5)$$

$$G_i(\mathbf{u}_p^*, \bar{\theta}) < 0 \quad i \notin \mathcal{A}(\mathbf{u}_p^*) \quad (2.6)$$

$$\nabla_r^2 \phi(\mathbf{u}_p^*, \bar{\theta}) > \mathbf{0} \quad (2.7)$$

avec  $J_k^{id} = \|\mathbf{y}_p(\mathbf{u}_k^*) - \mathbf{y}(\mathbf{u}_p^*, \bar{\theta})\|$  la fonction coût du problème d'identification à l'itération  $k$ ,  $\mathcal{A}(\mathbf{u}_p^*)$  l'ensemble des indices des contraintes actives en  $\mathbf{u}_p^*$ , et  $\nabla_r^2 \phi(\mathbf{u}_p^*, \bar{\theta})$  le Hessien réduit défini comme suit : si  $\mathbf{Z}$  est le noyau du Jacobian des contraintes actives et  $L = \phi + \boldsymbol{\nu}^T \mathbf{G}$  le Lagrangien du problème d'optimisation, alors  $\nabla_r^2 \phi = \mathbf{Z}^T \left[ \frac{\partial^2 L}{\partial \mathbf{u}^2} \right] \mathbf{Z}$ .

Les deux premières équations sont les conditions d'optimalité du problème d'identification, tandis que les trois dernières correspondent au problème d'optimisation.  $\mathbf{u}_p^*$  étant la solution du problème d'optimisation du procédé sa valeur est fixe, et les seuls degrés de liberté sont les paramètres du modèle  $\theta$ . On dispose donc de  $n_\theta$  degrés de liberté pour satisfaire les égalités et inégalités 2.3 à 2.7. Le problème, notamment en présence d'erreurs structurelles, est que *les égalités 2.3 occupent à elles seules les  $n_\theta$  degrés de liberté*. En conséquence, converger en  $\bar{\theta}$  ne garantit pas que l'on obtiendra  $\mathbf{u}_p^*$ .

Ces observations permettent de définir le concept de modèle adéquat : *un modèle sera dit adéquat pour le RTO two-step, s'il est capable de prédire un point KKT pour le procédé réel aux paramètres obtenus à convergence*. En d'autres termes, un modèle est adéquat pour être utilisé dans le cadre de l'application de RTO par les approches two-step si satisfaire en  $\bar{\theta}$  les deux premières équations de 2.3-2.7 implique la satisfaction des trois dernières, aux entrées optimales obtenues pour  $\bar{\theta}$ .

Si l'incertitude est paramétrique et que l'identité des paramètres incertains est connue, alors la résolution du problème d'identification va typiquement forcer la résolution du problème d'optimisation. En d'autres termes un modèle paramétriquement incertain, mais structurellement correct a de bonnes chances d'être adéquat pour RTO par les approches two-step. Par contre, un modèle structurellement faux n'a que de faibles chances d'être adéquat. Plutôt que de réconcilier les sorties du procédé et du modèle (ce qui est l'objectif du problème d'identification), il convient de réconcilier les conditions de KKT du modèle et procédé [9, 60].

## 2.2 “RTO via Modifier Adaptation” (RTO-MA)

La famille de méthodes sur laquelle une partie de mon activité de recherche s'est concentrée au cours des 5 dernières années est connue dans la littérature

sous le nom de “RTO via Modifier Adaptation” (RTO-MA). Ces méthodes s’appuient sur l’observation que pour être utilisé avec efficacité pour optimiser un procédé, un modèle doit être capable de prédire les conditions d’optimalité (conditions de KKT) du procédé. L’adaptation des modificateurs a pour but de corriger la façon dont le modèle prédit les conditions de KKT du procédé en construisant, sur la base de mesures, des corrections affines en la commande de la fonction coût et des contraintes du problème 1.3, partant de l’observation évidente que les conditions de KKT étant des conditions de premier ordre, des corrections de premier ordre sont suffisantes pour réconcilier les conditions de KKT du modèle et procédé.

### 2.2.1 Principe

L’idée de base est d’utiliser les mesures pour modifier et résoudre itérativement le problème basé sur le modèle (1.3) de telle sorte que ses conditions de KKT à convergence correspondent à celles du problème d’optimisation du procédé (1.1). Les modificateurs correspondent à chaque itération aux différences entre les valeurs prédites et mesurées de contraintes et du coût et entre les valeurs prédites et mesurées (ou estimées) des gradients du coût et des contraintes.

À l’itération  $k$ , les entrées  $\mathbf{u}_k^*$  sont appliquées au procédé, les valeurs prédites et mesurées susmentionnées sont comparées, et le problème suivant est résolu pour déterminer  $\mathbf{u}_{k+1}^*$  :

$$\mathbf{u}_{k+1}^* := \arg \min_{\mathbf{u}} \phi_m(\mathbf{u}) := \phi(\mathbf{u}) + \epsilon_k^\phi + \lambda_k^\phi (\mathbf{u} - \mathbf{u}_k^*) \quad (2.8)$$

$$\text{s.t.} \quad \mathbf{G}_m(\mathbf{u}) := \mathbf{G}(\mathbf{u}) + \epsilon_k^G + \lambda_k^G (\mathbf{u} - \mathbf{u}_k^*) \leq \mathbf{0} \quad (2.9)$$

$$\text{with} \quad \epsilon_k^\phi := \phi_p(\mathbf{u}_k^*) - \phi(\mathbf{u}_k^*) \quad (2.10)$$

$$\epsilon_k^G := \mathbf{G}_p(\mathbf{u}_k^*) - \mathbf{G}(\mathbf{u}_k^*) \quad (2.11)$$

$$\lambda_k^\phi := \nabla \phi_p(\mathbf{u}_k^*) - \nabla \phi(\mathbf{u}_k^*) \quad (2.12)$$

$$\lambda_k^G := \nabla \mathbf{G}_p(\mathbf{u}_k^*) - \nabla \mathbf{G}(\mathbf{u}_k^*), \quad (2.13)$$

avec le scalaire  $\epsilon_k^\phi$  et le vecteur  $\epsilon_k^G$ , de dimension  $n_G$ , qui représentent les modificateurs d’ordre 0, et le vecteur ligne  $\lambda_k^\phi$ , de dimension  $n_u$ , et la matrice  $\lambda_k^G$  de dimensions  $(n_G \times n_u)$ , qui représentent les modificateurs de 1<sup>er</sup> ordre. La Figure 2.3 illustre graphiquement l’approche.

La grande force de l’approche décrite par les eqns (2.8)-(2.13) est son aptitude à converger en un point KKT *du procédé réel* [96]. Les eqns (2.9) et (2.11) montrent qu’à la convergence en  $\mathbf{u}_\infty^*$  :

$$\mathbf{G}_m(\mathbf{u}_\infty^*) = \mathbf{G}(\mathbf{u}_\infty^*) + \epsilon_\infty^G = \mathbf{G}_p(\mathbf{u}_\infty^*) \leq \mathbf{0}. \quad (2.14)$$

Ainsi, les modificateurs d’ordre 0,  $\epsilon_k^G$  permettent de forcer la satisfaction des conditions de faisabilité  $\mathbf{G}_p(\mathbf{u}_\infty^*) \leq \mathbf{0}$ . Notons que le terme  $\epsilon_k^\phi$  qui translate verticalement la valeur prédite de la fonction coût ne change pas la position

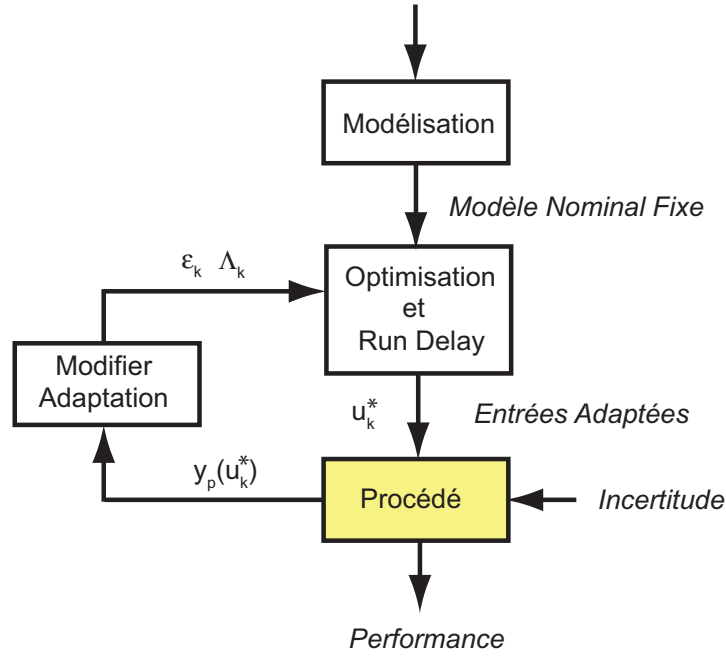


FIGURE 2.3 – Schéma de principe de “RTO via Modifier Adaptation”.

de son minimum. Il est donc souvent ignoré, sauf dans les cas où l’on désire améliorer la prédiction de la valeur de la fonction coût, tout du moins dans le voisinage de l’optimum.

De façon similaire, si l’on dérive (2.8) et (2.9) par rapport à  $\mathbf{u}$  et que l’on utilise (2.12) et (2.13), à convergence :

$$\nabla \phi_m(\mathbf{u}_\infty^*) = \nabla \phi(\mathbf{u}_\infty^*) + \boldsymbol{\lambda}_\infty^\phi = \nabla \phi_p(\mathbf{u}_\infty^*) \quad (2.15)$$

$$\nabla \mathbf{G}_m(\mathbf{u}_\infty^*) = \nabla \mathbf{G}(\mathbf{u}_\infty^*) + \boldsymbol{\lambda}_\infty^G = \nabla \mathbf{G}_p(\mathbf{u}_\infty^*). \quad (2.16)$$

Ainsi les corrections de premier ordre (dont les pentes sont  $\boldsymbol{\lambda}_k^\phi$  et  $\boldsymbol{\lambda}_k^G$ ) modifient les gradients du modèle de telle sorte que leurs valeurs convergées correspondent aux gradients du procédé. Combinées, les corrections d’ordre 0 et 1 conduisent à ce que les multiplicateurs de Lagrange convergés, associés au modèle, correspondent aux multiplicateurs associés au procédé, ce qui garantit que l’ensemble des contraintes actives est correctement déterminé.

**Remarques :**

1. Notons  $\phi_{err} = \phi_p(\mathbf{u}) - \phi(\mathbf{u})$  et  $\mathbf{G}_{err} = \mathbf{G}_p(\mathbf{u}) - \mathbf{G}(\mathbf{u})$  les erreurs de modélisation du coût et des contraintes. Il est alors aisé de démontrer que les modificateurs correspondent aux paramètres du développement en série de Taylor au premier ordre de  $\phi_{err}$  et  $\mathbf{G}_{err}$  au voisinage des entrées

de la  $k^{eme}$  itération,  $\mathbf{u}_k^*$  :

$$\begin{aligned}\phi_{err}(\mathbf{u}) &\simeq \phi_{err}(\mathbf{u}_k^*) + \nabla \phi_{err}(\mathbf{u}_k^*)(\mathbf{u} - \mathbf{u}_k^*) \\ &\simeq \phi_p(\mathbf{u}_k^*) - \phi(\mathbf{u}_k^*) + \left( \nabla \phi_p(\mathbf{u}_k^*) - \nabla \phi(\mathbf{u}_k^*) \right) (\mathbf{u} - \mathbf{u}_k^*) \\ &\simeq \boldsymbol{\epsilon}_k^\phi + \boldsymbol{\lambda}_k^\phi (\mathbf{u} - \mathbf{u}_k^*)\end{aligned}\quad (2.17)$$

De façon similaire :

$$\mathbf{G}_{err}(\mathbf{u}) \simeq \boldsymbol{\epsilon}_k^G + \boldsymbol{\lambda}_k^G (\mathbf{u} - \mathbf{u}_k^*), \quad (2.18)$$

Ainsi “RTO via modifier adaptation” peut également être interprétée comme une méthode où le modèle est corrigé. Cependant, contrairement aux méthodes de type two-step, la correction est ici une correction *fonctionnelle*, affine en la commande et pas une correction paramétrique. Les corrections sont directement effectuées au niveau des conditions nécessaires d’optimalité, au travers du coût et des contraintes, c’est à dire avec un objectif d’optimisation, dans les lignes de la “modélisation pour l’optimisation” [117, 14].

La modification fonctionnelle des contraintes est illustrée par la figure 2.4. On voit clairement que la différence de valeurs entre les contraintes si-

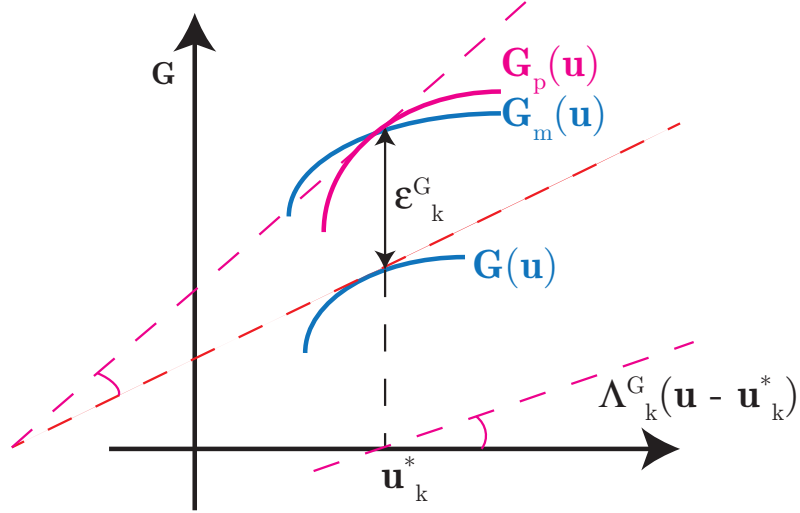


FIGURE 2.4 – Modification des contraintes lors de “RTO via Modifier Adaptation”.

mulées et mesurées est utilisée pour translater verticalement le modèle de la contrainte, tandis que la différence des pentes des contraintes mesurées et prédites est utilisée comme pente du terme correcteur linéaire.

2. En pratique RTO-MA est implanté en ajoutant un filtre exponentiel pour le calcul des modificateurs, avec les modificateurs filtrés qui s’écrivent :

$$\boldsymbol{\Lambda}_{f,k+1} = \mathbf{K} \boldsymbol{\Lambda}_k + (\mathbf{I} - \mathbf{K}) \boldsymbol{\Lambda}_{f,k-1} \quad (2.19)$$

, en notant le vecteur des modificateurs (de dimension  $(n_u + 1)(n_G + 1)$ ) :

$$\mathbf{\Lambda}_k^T = \left[ \epsilon_k^\phi, \epsilon_k^{G_1}, \dots, \epsilon_k^{G_{n_G}}, \boldsymbol{\lambda}_k^{\phi^T}, \boldsymbol{\lambda}_k^{G_1^T}, \dots, \boldsymbol{\lambda}_k^{G_{n_G}^T} \right]. \quad (2.20)$$

Ce filtrage exponentiel a le double avantage de limiter le risque que les modifications du problème d’optimisation ne soient trop “abruptes” entre deux itérations, tout en réduisant l’impact du bruit de mesure. Il préserve les propriétés de RTO-MA à convergence et ajoute de nouveaux degrés de liberté, i.e. les éléments de la matrice de gain  $\mathbf{K}$ , qui peuvent en conséquence utilisés pour forcer la convergence [97].

### 2.2.2 “Model adequacy”

Pour fonctionner, l’approche two-step nécessite que le modèle soit adéquat, et qu’il soit ainsi capable de prédire, pour le jeu de paramètres obtenus à la convergence, que la solution du problème associé au procédé au procédé  $\mathbf{u}_p^*$  est bien un point KKT pour le modèle.

De la même façon, le modèle du procédé doit posséder des propriétés particulières, i.e. *être adéquat* pour être utilisé avec RTO-MA. Cependant puisqu’il n’y a pas de problème d’identification à résoudre, les conditions d’adéquation n’ont pas à intégrer les 2 premières conditions des équations 2.3 à 2.7. De plus la troisième et la quatrième conditions sont implicitement satisfaites à convergence par les modificateurs d’ordre 0 (satisfaction des contraintes et détection de l’ensemble des contraintes actives) et la deuxième condition est garantie à convergence par l’utilisation des modificateurs d’ordre 1. Il reste donc une seule condition, celle de deuxième ordre :

$$\nabla_r^2 \phi(\mathbf{u}_p^*, \boldsymbol{\theta}) > \mathbf{0} \quad (2.21)$$

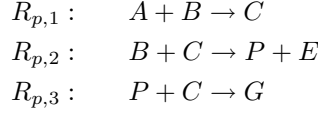
Notons qu’à convergence les paramètres du modèle sont bien toujours  $\boldsymbol{\theta}$  puisque le modèle reste fixe avec RTO-MA.

Les conditions d’adéquation sont donc bien plus aisées à satisfaire que dans le cas du two-step. Néanmoins, l’adéquation est une propriété du modèle qui ne peut être vérifiée a priori puisque sa vérification nécessiterait la connaissance de l’ensemble des contraintes actives, et surtout de l’optimum du procédé  $\mathbf{u}_p^*$ . Nous verrons ultérieurement que l’une de mes contributions récentes a été de proposer une approche pour garantir a priori que le modèle utilisé est adéquat pour RTO-MA.

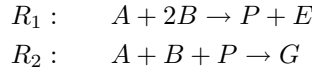
## 2.3 Exemple illustratif

Dans cette section est présenté brièvement un exemple [63] qui illustre l’incapacité de la méthode two-step et, a contrario l’aptitude de RTO-MA de converger à l’optimum du procédé en présence d’incertitude structurelle.

Les deux approches sont donc appliquées au réacteur de Williams-Otto [122], un réacteur parfaitement agité à marche continue, siège des trois réactions :



On dispose d'un modèle, structurellement faux, qui considère les réactions suivantes :



qui correspondent aux réactions apparentes, sommes de la première et de la deuxième et de la première et troisième réaction, respectivement.

Les entrées manipulables du problème d'optimisation  $\mathbf{u} = [F_B, T_R]^T$  sont le débit d'alimentation en B ( $F_B$ ) et la température du réacteur ( $T_R$ ). L'objectif est de maximiser le profit opératoire qui s'écrit :

$$\phi_p = 1143.8 \bar{X}_P F + 25.92 \bar{X}_E F - 76.23 F_A - 114.34 F_B \quad (2.22)$$

avec  $\bar{X}_P$  et  $\bar{X}_E$  qui représentent les fractions massiques de  $P$  et de  $E$  dans le courant de sortie à l'état stationnaire,  $F_A = 1.8275$  kg/s et  $F_B$  les débits d'alimentation en  $A$  et  $B$ , respectivement, et  $F = F_A + F_B$  le débit de sortie du réacteur. Pour l'approche two-step, les constantes pré-exponentielles des réactions  $R_1$  et  $R_2$ , i.e.  $k_{10}$  et  $k_{20}$ , respectivement, sont considérées comme incertaines et adaptées suivant le schéma des équations (2.1-2.2). Les détails concernant le modèle (valeurs des énergies d'activation, par exemple) sont disponibles dans la thèse [96].

Les deux approches sont appliquées successivement. La figure 2.5 récapitule la différence fondamentale entre les deux approches, à savoir l'adaptation des paramètres du modèle pour le two-step et l'adaptation des modificateurs pour RTO-MA.

Le problème étant sans non contraint, les seuls modificateurs sont les modificateurs de premier ordre de la fonction coût, à savoir  $\lambda_k^\phi := \nabla \phi_p(\mathbf{u}_k^*) - \nabla \phi(\mathbf{u}_k^*)$ , c'est à dire le vecteur dont les éléments correspondent aux différences entre les gradients de la fonction coût du procédé et du modèle, par rapport à  $F_B$  et  $T_R$ .

Dans les figures (2.6) et (2.7) sont tracés les contours de la fonction objectif pour le procédé réel, dont l'optimum est situé en  $\mathbf{u}_p^*$ , cerclé de pointillés rouges. Comme on le voit, en initialisant en trois points différents, dont l'optimum du procédé, la méthode two-step converge toujours au même point - cerclé de pointillés noirs -, qui n'est pas l'optimum du procédé, cerclé de pointillés rouges. Par contre, on peut observer dans la Figure 2.7, que RTO-MA converge à l'optimum du procédé, malgré l'erreur structurelle du modèle.

La figure 2.8 montre l'amélioration de la fonction coût normalisée du problème d'identification paramétrique (problème de moindres carrés entre les sorties

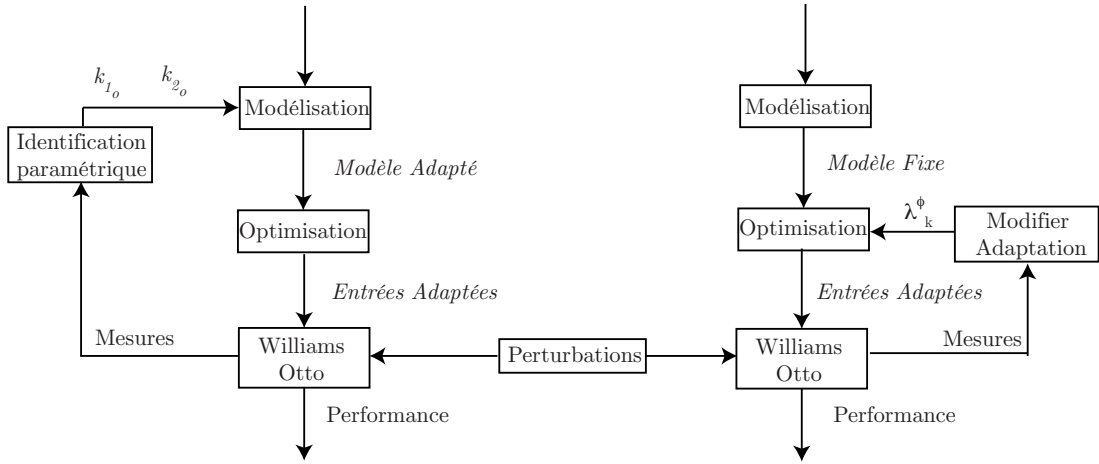


FIGURE 2.5 – Application de la méthode two-step (gauche) et de RTO-MA (droite) au réacteur de Williams-Otto.

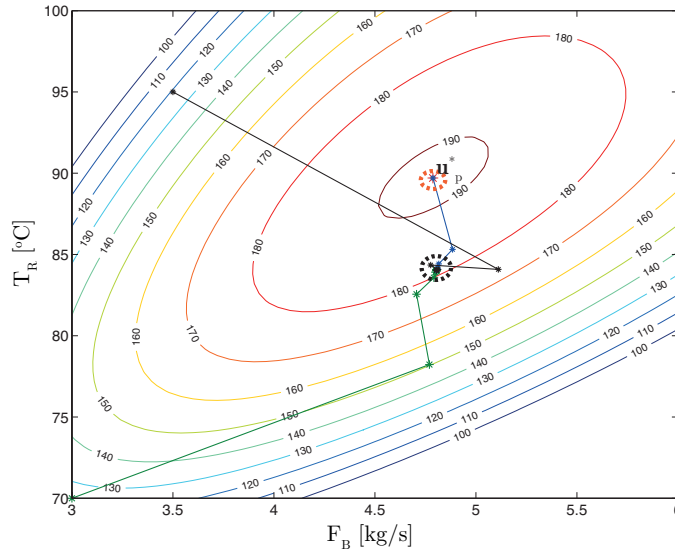


FIGURE 2.6 – Application de la méthode two-step au réacteur de Williams-Otto.

prédites et modélisées) rendue possible par l'adaptation des constantes pré-exponentielles des deux réactions du modèle, pour un des trois points initiaux de la méthode two-step. Cela illustre clairement qu'il n'est pas suffisant d'améliorer la prédiction des sorties pour améliorer les performances d'un procédé, en présence d'erreurs structurelles de modélisation.



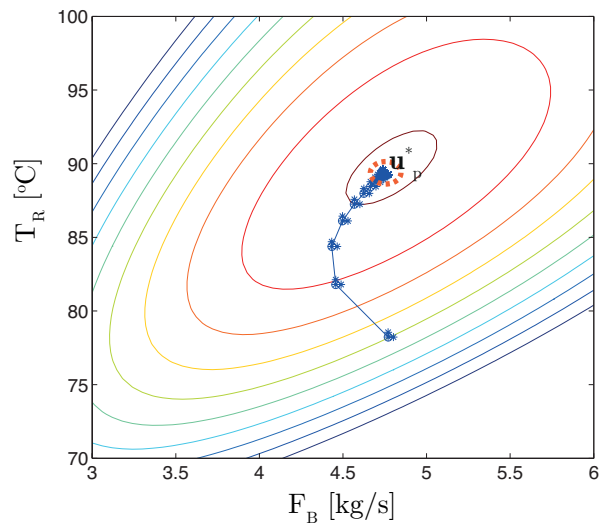


FIGURE 2.7 – Application de RTO-MA au réacteur de Williams-Otto.

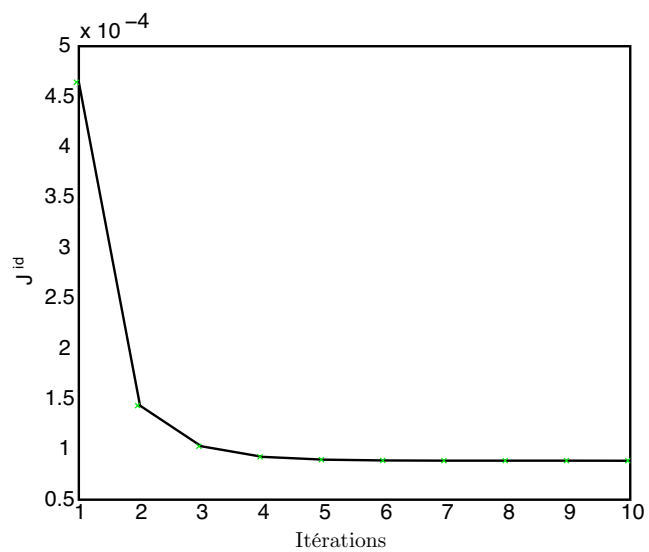


FIGURE 2.8 – Amélioration de l'erreur des prédictions par application de la méthode two-step au réacteur de Williams-Otto.

## Chapitre 3

# Axes de Recherche Méthodologique et Contributions dans le domaine de RTO

### 3.1 Introduction

Dans ce chapitre, sont décrites les principales contributions récentes dont j'ai été l'auteur et/ou le co-auteur dans le domaine de RTO. L'essentiel de ce qui est présenté ci-après correspond aux travaux de recherche effectués depuis 2004, i.e. après l'obtention de ma thèse. Ces résultats méthodologiques sont le fruit de travaux personnels et/ou en collaboration. Ils correspondent aussi aux résultats principaux de doctorants et de jeunes chercheurs que j'ai eu l'opportunité de co-encadrer.

La motivation de ces travaux réside dans la nécessité de lever un certain nombre de verrous scientifiques pour pouvoir appliquer les méthodes de RTO (donc RTO-MA) de façon plus systématique dans l'industrie. Il est ainsi nécessaire de répondre à un certain nombre de questions liées à plusieurs des principales limitations intrinsèques des méthodes de RTO en général (et de RTO-MA en particulier) :

- comment garantir que le modèle est adéquat pour RTO-MA a priori ?,
- peut-on appliquer RTO-MA durant la phase transitoire entre deux régimes stationnaires et ainsi éviter de multiplier les itérations de régime permanent à régime permanent ?,
- comment estimer les modificateurs d'ordre 1 (i.e. les gradients du procédé) sur la base de mesures en régime permanent ?, sur la base de mesures transitoires ?, peut-on utiliser le modèle ?,
- comment garantir qu'une méthode de RTO va converger ?,

- peut-on garantir que les itérations sont faisables (i.e. chaque itération conduit à une réalisation du *procédé* qui respecte les contraintes du *procédé*) ?,
- dans quelle mesure peut-on appliquer RTO-MA aux problèmes d’optimisation dynamique ?
- que se passe-t-il lorsque l’on applique une méthode RTO à un procédé dynamique *en boucle fermée* ?

La première question est fondamentale. Bien sûr pour être efficace, une “bonne méthode” de RTO doit être capable de fonctionner en présence d’incertitude structurelle. Pour cela la propriété clef est l’adéquation du modèle. Cependant, cette propriété est une propriété du procédé, aux entrées optimales inconnues a priori. Sans développement supplémentaire, on sait donc que RTO-MA, par exemple, peut fonctionner en présence d’incertitude structurelle si le modèle est adéquat, mais que l’on ne peut pas garantir qu’il l’est. La deuxième question permet d’éviter un nombre prohibitif d’itérations. S

## 3.2 Utilisation d’approximations convexes pour garantir l’adéquation du modèle

### 3.2.1 Principe

La première des limitations de l’applicabilité de RTO-MA tient à la nécessité de disposer d’un modèle adéquat. C’est est une propriété du *modèle* qui doit être vérifiée à la solution du problème du *procédé* qui est inconnue. Dans le cadre de mon travail de recherche personnel (i.e. hors supervision de thèses et/ou de projets), nous avons récemment proposé d’utiliser en lieu et place du modèle une approximation convexe de ce dernier. En effet puisque RTO-MA est susceptible de fonctionner avec un modèle structurellement faux, pourquoi ne pas considérer cette propriété comme un degré de liberté pour “choisir” une structure pour un modèle approché qui soit avantageuse pour l’optimisation ?

L’avantage d’utiliser une approximation convexe est précisé dans le théorème et le corrolaire suivants :

#### **Théorème 1**

Soit le problème d’optimisation (1.1) dont la solution et les multiplicateurs de Lagrange optimaux sont notés  $\mathbf{u}_p^*$  et  $\boldsymbol{\nu}_p^*$ , respectivement. Si le modèle du coût et le modèle des contraintes ( $\phi$  et  $\mathbf{G}$ ) sont des fonctions strictement convexes, alors les propriétés suivantes sont vérifiées :

1. Le problème d’optimisation modifié (2.8)-(2.13) est un programme convexe pour tout  $k$ .
2. La condition de “model adequacy” est vérifiée en tout  $k$ .

La théorème et la preuve ont été publiés dans “Industrial & Engineering Chemistry Research” [64].

#### **Remarques**

1. Le message de ce théorème est que l'utilisation d'approximations convexes permet de garantir que la condition de "model adequacy" sera satisfaite aux entrées optimales du procédé qui sont inconnues, car la convexité stricte garantit la satisfaction de cette propriété pour toute valeur de  $\mathbf{u}$ , et donc pour  $\mathbf{u} = \mathbf{u}_p^*$ , ce qui apparaît clairement dans la démonstration [64]. Ainsi, il n'est plus nécessaire de connaître  $\mathbf{u}_p^*$  pour garantir que le modèle est adéquat pour RTO-MA.
2. En remplaçant le modèle par une approximation convexe, on peut utiliser les solveurs de problèmes convexes, réputés beaucoup plus rapides et fiables.
3. L'approximation convexe est utile pour un problème de minimisation avec des contraintes de type  $\leq$ . Pour un problème de maximisation, ou si les contraintes sont exprimées en  $\geq$  il convient d'utiliser des approximations concaves.
4. La preuve de ce théorème ne s'appuie que sur la convexité stricte de la fonction coût ou de l'une des contraintes. Le corollaire suivant exploite cette particularité.

#### Corollaire 1

Soit le problème d'optimisation (1.1) dont la solution et les multiplicateurs de Lagrange optimaux sont notés  $\mathbf{u}_p^*$  et  $\boldsymbol{\nu}_p^*$ , respectivement et l'algorithme RTO-MA (2.8)-(2.13). Soient  $\mathbf{G}^{s,a}$  les  $n_{s,a}$  contraintes **fortement actives** et  $\boldsymbol{\nu}_p^{*s,a}$  les multiplicateurs de Lagrange correspondants tels que  $\mathbf{G}^{s,a}(\mathbf{u}_p^*) = \mathbf{0}$  et  $\boldsymbol{\nu}_p^{*s,a} > \mathbf{0}$ , et  $\mathbf{G}^{w,a}$  les  $\tau - n_{s,a}$  contraintes **faiblement actives** et  $\boldsymbol{\nu}_p^{*w,a}$  es multiplicateurs de Lagrange correspondants tels que  $\mathbf{G}^{w,a}(\mathbf{u}_p^*) = \mathbf{0}$  et  $\boldsymbol{\nu}_p^{*w,a} = \mathbf{0}$ . Pour que le Théorème 1 s'applique, il est suffisant que : (i) la fonction coût soit strictement convexe, les contraintes actives  $\mathbf{G}^a$  étant convexes, ou (ii) au moins une des contraintes fortement actives  $\mathbf{G}^{s,a}$  soit strictement convexe, les autres contraintes et la fonction coût étant convexes.

La preuve est disponible dans [64].

L'intérêt de ce corollaire est qu'en particulier, il suffit d'approximer la fonction coût par une fonction strictement convexe et les contraintes par des fonctions convexes, voire linéaires pour disposer d'un modèle adéquat. C'est particulièrement intéressant si une ou plusieurs contraintes (du modèle) exhibent plutôt un comportement concave, puisqu'il sera alors préférable – pour ne pas péjorer de trop la qualité de l'approximation – d'approcher ces contraintes par des fonctions linéaires plutôt que convexes.

#### Remarques

Ainsi :

1. Les conditions d'adéquation peuvent être satisfaites : (i) a priori, (ii) à chaque itération et (iii) sans connaissance de la solution  $\mathbf{u}_p^*$ ,
2. La séquence de NLPs est remplacée par une séquence de programmes convexes,

3. L'utilisation d'approximations du modèle, en lieu et place du modèle ne pèjore pas la capacité de RTO-MA de converger à l'optimum du procédé [64],
4. Les solveurs de problèmes convexes peuvent être utilisés : même si de plus nombreuses itérations peuvent être requises – puisque l'on remplace un modèle par un autre modèle potentiellement moins précis – chacune de ces itérations peut être réalisée plus rapidement,
5. Le taux de succès de ces solveurs est bien supérieur à celui des solveurs NLP classiques (par ex. les solveurs "SQP" de programmation quadratique successive), certains atteignent virtuellement 100%, [56], ce qui minimise les risques, pour une implantation expérimentale ou industrielle [110].
6. Il est intéressant de noter que le modèle du procédé n'étant pas a priori convexe, il convient donc dans le cas général de remplacer  $\phi$  et  $\mathbf{G}$  par des approximations convexes (notées  $\phi_c$  et  $\mathbf{G}_c$ , respectivement) pour appliquer RTO-MA. Il ne s'agit pas de construire une approximation convexe du procédé, mais bien du *modèle du procédé*. Cette approximation est donc construite sur la base de simulations et ne nécessite pas d'expériences supplémentaires.

### 3.2.2 Méthode pour générer une approximation convexe

Plusieurs techniques [59, 129] existent dans la littérature pour construire des approximations convexes notées ici  $\phi_c(\mathbf{u})$  et  $\mathbf{G}_c(\mathbf{u})$  – l'absence d'indice  $p$  indiquant, si besoin est, que ces approximations ne concernent pas le procédé mais son modèle. La plupart des méthodes ont pour objectif de construire une approximation locale, i.e. avec une grande précision autour du point où l'approximation est construite, pour ensuite adapter ces approximations au fur et à mesure des itérations. C'est d'ailleurs la philosophie des méthodes numériques de type SQP. Comme RTO-MA fonctionne avec un modèle fixe, ce n'est pas le cas ici.

Nous avons proposé une approche très simple pour construire une telle approximation en identifiant un modèle de surface à partir de résultats de simulation [64]. Dans la pratique, on réalise  $n_s$  simulations pour  $n_s$  valeurs différentes de  $\mathbf{u}$  telles que  $\mathbf{u}_i \in [\mathbf{u}_{min} \ \mathbf{u}_{max}] \forall i \in [1, n_s]$ , pour résoudre ensuite un problème aux moindres carrés entre les valeurs simulées par le "vrai" modèle  $\phi(\mathbf{u})$  et les valeurs de  $\phi_c(\mathbf{u})$  en s'assurant que le Hessien de  $\phi_c(\mathbf{u})$  a ses valeurs propres strictement positives. On procède ensuite de la même façon avec les contraintes, ou, plus simplement, on fitte pour ces dernières de simples approximations linéaires, puisque l'on sait qu'il suffit pour que le modèle soit adéquat que  $\phi_c$  soit strictement convexe et  $\mathbf{G}_c$  soit linéaire.

Comme RTO-MA a de grandes chances d'être initialisé aux entrées nominales  $\mathbf{u}^*$  (i.e. la solution du problème 1.3), il convient que  $\phi$  et  $\phi_c$  ainsi que  $\mathbf{G}$  et  $\mathbf{G}_c$  coïncident aux entrées nominales, ou, à défaut aux entrées initiales.

Par exemple, si l'on considère un problème d'optimisation avec  $n_G = 2$  contraintes, pour obtenir les approximations strictement convexes  $\phi_c$  et linéaires

$G_{1,c}$  et  $G_{2,c}$  de  $\phi$ ,  $G_1$  et  $G_2$ , respectivement, on peut résoudre les trois problèmes aux moindres carrés :

$$\min_{a_\phi, b_\phi, \mathbf{Q}_\phi} \sum_1^{n_s} \|\phi(\mathbf{u}_i) - \phi_c(\mathbf{u}_i)\|_2 \quad (3.1)$$

$$\text{s.t. } \phi_c(\mathbf{u}) = \phi(\mathbf{u}^*) + [a_\phi, b_\phi] (\mathbf{u} - \mathbf{u}^*) + \frac{1}{2} (\mathbf{u} - \mathbf{u}^*)^T \mathbf{Q}_\phi (\mathbf{u} - \mathbf{u}^*) \quad (3.2)$$

$$q_{\phi_{12}} = q_{\phi_{21}} \quad (3.3)$$

$$\mathbf{eig}(\mathbf{Q}_\phi) > \mathbf{0} \quad (3.4)$$

$$\min_{a_{G_1}, b_{G_1}} \sum_1^{n_s} (\|G_1(\mathbf{u}_i) - G_{1,c}(\mathbf{u}_i)\|_2) \quad (3.5)$$

$$\text{s.t. } G_{1,c}(\mathbf{u}) = G_1(\mathbf{u}^*) + [a_{G_1}, b_{G_1}] (\mathbf{u} - \mathbf{u}^*) \quad (3.6)$$

$$\min_{a_{G_2}, b_{G_2}} \sum_1^{n_s} (\|G_2(\mathbf{u}_i) - G_{2,c}(\mathbf{u}_i)\|_2) \quad (3.7)$$

$$\text{s.t. } G_{2,c}(\mathbf{u}) = G_2(\mathbf{u}^*) + [a_{G_2}, b_{G_2}] (\mathbf{u} - \mathbf{u}^*) \quad (3.8)$$

Les scalaires  $a_\phi, b_\phi, a_{G_1}, b_{G_1}, a_{G_2}, b_{G_2}$  et la matrice  $(2 \times 2)$   $\mathbf{Q}_\phi = \begin{bmatrix} q_{\phi_{11}} & q_{\phi_{12}} \\ q_{\phi_{21}} & q_{\phi_{22}} \end{bmatrix}$  sont les degrés de liberté de ces trois problèmes et sont donc manipulés pour, par exemple, minimiser la somme des distances normalisées entre les valeurs de  $\phi(\mathbf{u})$  et  $\phi_c(\mathbf{u})$ ,  $G_1(\mathbf{u})$  et  $G_{1,c}(\mathbf{u})$  et  $G_2(\mathbf{u})$  et  $G_{2,c}(\mathbf{u})$ , pour toutes les simulations en  $\mathbf{u} \in [\mathbf{u}_{min} \mathbf{u}_{max}]$  dont on dispose. Pour forcer  $\phi_c$  à être strictement convexe il suffit alors d'ajouter au problème de moindres carrés deux contraintes : (i)  $\mathbf{Q}_\phi$  est symétrique, comme indiqué par l'équation 3.3, et (ii) les valeurs propres de  $\mathbf{Q}_\phi$  sont plus grandes qu'une valeur positive prédéfinie ou strictement positives, comme indiqué par l'équation 3.4. D'un point de vue conceptuel, cette valeur n'est pas importante puisque seule la positivité stricte des valeurs propres conditionne la convexité stricte de  $\phi_c$ . Par contre d'un point de vue pratique, elle influence directement la qualité du modèle  $\phi_c$  qui sera par suite utilisé pour RTO-MA, et peut donc conditionner la vitesse de convergence de l'algorithme.

### 3.2.3 Estimation des gradients du procédé

RTO-MA possède la propriété de potentiellement converger à un point KKT du procédé réel pour autant que l'on soit capable de mesurer ou d'estimer les gradients du procédé nécessaires au calcul des modificateurs d'ordre 1, i.e.  $\lambda^{\phi^T}$  et  $\lambda^{G^T}$ . J'ai concentré une partie de mes activités de recherche sur cette problématique, suivant deux axes : (i) comment estimer les gradients du procédé sur la base des mesures obtenues en régime permanent et (ii) comment utiliser les mesures transitoires. Notons que la première approche correspond clairement au cadre d'application de RTO-MA, comme illustré par la Figure 3.1, à savoir :

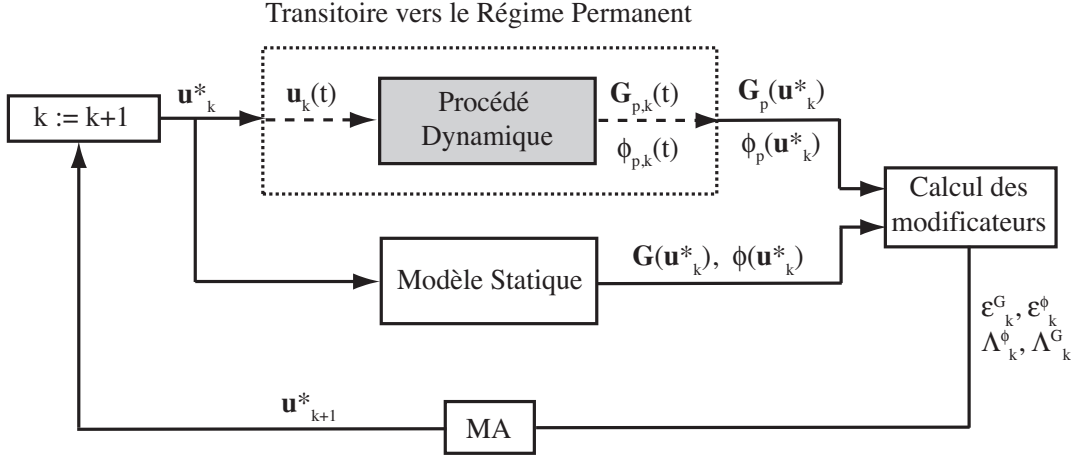


FIGURE 3.1 – Schéma de principe de l'utilisation de RTO-MA pour l'optimisation des procédés en régime permanent.

1. Résoudre le problème d'optimisation,
2. Appliquer uniformément les conditions opératoires optimales obtenues,
3. Attendre que le procédé atteigne le régime permanent,
4. Mesurer et/ou estimer les contraintes, la fonction coût et les gradients,
5. Calculer les modificateurs et retourner en (1).

### 3.2.4 Utilisation des mesures en régime permanent

Estimer les gradients en régime permanent correspond à estimer les gradients d'une fonction inconnue, i.e. dont on ne connaît pas l'expression fonctionnelle. Il est néanmoins possible d'accéder à la valeur de la fonction en tout point choisi, ce qui dans le cas des procédés implique de réaliser une expérience pour un choix de conditions opératoires. C'est une problématique classique qui est présente dans des domaines d'ingénierie très variés [100, 38, 47]. Dans le contexte de l'optimisation en temps réel, ce problème a été considéré par de nombreux auteurs [95, 19, 75, 98]. C'est également un sujet de recherche actif en optimisation numérique, notamment dans le cas où la fonction numérique à optimiser est de type boîte noire et pour lesquelles les évaluations de la fonction sont coûteuses en temps de calcul [34].

En soi, l'estimation du gradient ou des dérivées d'une fonction à partir de mesures discrètes – dans notre cas les valeurs de  $\phi_p(\mathbf{u}_k^*)$ ,  $\mathbf{G}_p(\mathbf{u}_k^*)$  et éventuellement de grandeurs de sorties en régime établi – est un problème inverse, mal posé [53]. En effet, l'application directe de la définition de la dérivée, i.e. la limite d'une différence finie quand le pas tend vers zéro, conduit systématiquement à  $\pm\infty$  en présence de bruit de mesure. Pour contourner cet écueil, une approche classique est de régulariser les données dont on dispose, et donc d'énoncer une hypothèse

sur la nature de la fonction dont on essaie de déterminer le gradient. Il est possible de supposer, par exemple, que cette fonction  $f$  est  $K$ -Lipschitzienne dans chacune des directions de  $\mathbf{u}$ , ce qui conduit à la définition de bornes globales sur tous les éléments du gradient de  $f(\mathbf{u})$ . Il est aussi possible de supposer que  $f$  possède une propriété particulière (par ex. que  $f$  est linéaire, quadratique, ou lisse), ce qui a conduit à des méthodes génériques de régularisation comme celle de Tikhonov [127]. Malgré tous ces efforts, aucune méthode d'estimation de gradients n'a, à ce jour, suffisamment convaincu pour devenir un standard. Cela tient notamment au fait que l'application de ces méthodes conduit uniquement à l'obtention d'une valeur estimée des gradients, sans qu'aucune information sur sa validité (de type intervalle de confiance) ne soit disponible.

Dans le cadre de son travail de recherche, que j'ai co-encadré avec le Professeur Bonvin, Gene Bunin a proposé une méthode de régularisation et d'estimation de gradients légèrement différente dans sa philosophie [20]. Sans rentrer dans les détails techniques par souci de concision (le lecteur intéressé est invité à consulter [20]), l'approche proposée consiste à : (i) supposer la validité d'une structure *locale*, i.e. au voisinage du point où l'on cherche à obtenir le gradient, et d'une densité de probabilité pour le bruit de mesure, (ii) effectuer la régularisation sous la contrainte de la structure choisie en maximisant un critère de vraisemblance, (iii) calculer les bornes inférieures et supérieures du gradient de  $f$  avec sa structure supposée sans perte de validité statistique, et (iv) si la structure est *paramétrique* et donc explicite (linéaire, quadratique ,...) l'utiliser pour estimer le gradient, sinon considérer, par exemple, la valeur moyenne des bornes comme l'estimé du gradient.

Dans sa formulation générale le problème de maximisation de la vraisemblance s'écrit :

$$\max_{\hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{w}}, \hat{\mathbf{F}}, \hat{\mathbf{d}}} \prod_{i=1}^n p(\hat{w}_i) \quad (3.9)$$

$$\text{s.t.} \quad \hat{w}_i = y_i - \hat{y}_i, \quad i = 1, \dots, n \quad (3.10)$$

$$\hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{F}}, \hat{\mathbf{d}} \in S \quad (3.11)$$

, avec  $p : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  qui dénote la densité de probabilité du bruit,  $\hat{\mathbf{y}} \in \mathbb{R}^n$  les sorties (sans bruit) estimées selon la structure choisie,  $\mathbf{y}$  les sorties mesurées (i.e. les  $n$  points expérimentaux considérés pour estimer le gradient),  $\hat{\mathbf{w}} \in \mathbb{R}^n$  les valeurs estimées du bruit,  $\hat{\mathbf{F}} \in \mathbb{R}^{n_u \times n}$  la matrice des gradients estimés  $[\nabla \hat{f}(\mathbf{u}_1) \dots \nabla \hat{f}(\mathbf{u}_n)]$ , et  $\hat{\mathbf{d}}$  un vecteur de variables auxiliaires qui dépend de la structure  $S$  supposée.

En fait, le choix d'une structure  $S$  impose une forme fonctionnelle à la fonction  $f$  dont on cherche le gradient. Le problème (3.9) détermine la valeur optimale des variables structurels de  $f$ , pour le choix de la structure  $S$  de telle sorte à maximiser la probabilité de la réalisation du bruit ( $\hat{\mathbf{w}}$ ) que l'on déduit de l'équation 3.10.

Quatre structures pour  $S$  ont été proposées et étudiées : (i) les fonctions linéaires, (ii) les fonctions quadratiques, (iii) les fonctions convexes/concaves, et



(iv) les différences de fonctions convexes bornées. Les deux premières sont des structures paramétriques qui ajoutent des contraintes d'égalité au problème 3.9, tandis que les deux dernières sont des structures non paramétriques qui ajoutent des contraintes d'inégalité.

Par exemple, si l'on suppose que la fonction est quadratique et que la matrice des coefficients quadratiques  $\hat{\mathbf{Q}} \in \mathbb{R}^{n_u \times n_u}$  est diagonale, le problème 3.9 devient :

$$\max_{\hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{w}}, \hat{\mathbf{F}}, \hat{\mathbf{Q}}, \hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}} \prod_{i=1}^n p(\hat{w}_i) \quad (3.12)$$

$$\text{s.t.} \quad \hat{w}_i = y_i - \hat{y}_i, \quad i = 1, \dots, n \quad (3.13)$$

$$\hat{y}_i = \mathbf{u}_i^T \hat{\mathbf{Q}} \mathbf{u}_i + \hat{\mathbf{a}}^T \mathbf{u}_i + \hat{b}, \quad i = 1, \dots, n \quad (3.14)$$

$$\nabla \hat{f}(\mathbf{u}_i) = 2 \hat{\mathbf{Q}} \mathbf{u}_i + \hat{\mathbf{a}}, \quad i = 1, \dots, n \quad (3.15)$$

$\hat{\mathbf{d}}$  correspond ici aux éléments  $\hat{\mathbf{Q}}, \hat{\mathbf{a}}, \hat{b}$  et découlent du fait que  $f$  est supposée quadratique. La résolution de (3.12) conduit donc aux meilleures valeurs de  $\hat{\mathbf{Q}}, \hat{\mathbf{a}}, \hat{b}$ , pour lesquelles  $\hat{\mathbf{y}}$  est prédit de telle sorte que la probabilité de réalisation du bruit estimé (dédit de  $\hat{\mathbf{w}} = \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}$ ) est maximale. Les éléments du gradient estimé de  $f$  se déduisent alors directement de  $\nabla \hat{f}(\mathbf{u}_i) = 2 \hat{\mathbf{Q}} \mathbf{u}_i + \hat{\mathbf{a}}$ .

L'avantage de cette approche, résumée dans le Théorème 1 de [20], est que si l'hypothèse sur la structure  $S$  est vérifiée au sens d'une probabilité *choisie par l'utilisateur*, alors il est garanti à la même probabilité que les bornes que l'on calcule avec l'algorithme proposé dans [20] contiennent le "vrai" gradient de la fonction  $f$ , et donc pour RTO-MA de  $\phi_p$  et/ou de  $\mathbf{G}_p$ . Comme il est impossible sauf à disposer d'une infinité d'échantillons, de garantir qu'une structure est valide, une approche pour garantir, a contrario, qu'une structure  $S$  peut être rejetée avec une probabilité de  $P$  a été proposée [20], avec une méthode et un algorithme pour calculer les bornes sur le gradient. L'ensemble a été testé sur plusieurs fonctions numériques, bruitées et supposées inconnues. Notons enfin que la contribution principale de [20] étant de nature générique – il s'agit d'un travail essentiellement méthodologique –, l'approche est flexible et peut s'accomoder de l'utilisation d'autres structures, pour autant que l'on puisse reformuler et résoudre le problème (3.9) en conséquence.

Les quatre structures susmentionnées sont intéressantes en ce qu'elles suivent une progression dans leur généralité. L'hypothèse de linéarité étant celle qui est clairement la plus restrictive et donc celle qui a le moins de chances d'être valide. Par contre c'est celle qui de part sa nature paramétrique triviale, conduit aux bornes les plus étroites. Inversement, postuler que les points discrets dont on dispose sont les images d'une fonction s'écrivant comme la différence de fonctions convexes bornées a beaucoup plus de chances d'être statistiquement valide, au prix de bornes inférieures et supérieures sur le gradient beaucoup plus éloignées. A ce titre, l'hypothèse que  $f$  est localement quadratique représente un bon compromis entre obtenir une bonne probabilité de validité (ou selon [20] une faible probabilité d'invalidité) et obtenir des bornes resserrées.

Enfin, de façon générale, il est clair que si une structure  $S$ , valide, est de nature paramétrique, alors on obtient directement un estimé des gradients. Dans

le cas contraire, la moyenne des bornes fournit un estimé du gradient d'autant plus précis que ces bornes sont proches l'une de l'autre.

### 3.2.5 Utilisation des mesures en régime permanent et du modèle

Dans le cas où l'on dispose d'un modèle du procédé il est bien évidemment possible et souhaitable de l'utiliser par exemple pour choisir une structure  $S$  qui a de grandes chances d'être valide. Dans le cas où le modèle est paramétriquement incertain, et lorsque le nombre  $q$  et l'identité des paramètres incertains  $\theta$  est connue<sup>1</sup>, il est possible d'utiliser cette connaissance pour construire un estimateur du gradient, alimenté par les mesures disponibles en régime permanent basé sur une analyse variationnelle du modèle. J'ai dans le cadre de ma recherche personnelle, proposé une extension de l'estimation de la fonction coût proposé une extension évidente de l'approche variationnelle de la méthode de "Neighboring Extremals" [78] (NE) qui dans sa version originale considère uniquement les problèmes sans contraintes.

L'incertitude paramétrique conduit à ce que les entrées et les sorties optimales dévient de leurs valeurs nominales, obtenues pour  $\theta = \theta_0$ . Dans le cas sans contraintes, NE propose justement d'estimer le gradient de la fonction coût uniquement, sur la base d'une analyse variationnelle autour des entrées *nominales*  $\mathbf{u}_0^*$  obtenues pour les valeurs nominales des paramètres incertains  $\theta_0$ , pour lesquelles le gradient du modèle est nul  $\nabla_{\mathbf{u}}\phi(\mathbf{u}_0^*, \theta_0) = \mathbf{0}$ .

Considérons donc le problème 1.3, adjoint des  $p$  prédictions des sorties en régime permanent  $\bar{\mathbf{y}} = \mathbf{H}(\mathbf{u}, \theta)$  qui correspondent aux  $p$  sorties mesurées du procédé en régime permanent  $\bar{\mathbf{y}}_p$

De  $\bar{\mathbf{y}} = \mathbf{H}(\mathbf{u}, \theta)$ , la variation des sorties du modèle en régime permanent s'écrit :

$$\delta\bar{\mathbf{y}} = \nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{H} \delta\mathbf{u} + \nabla_{\theta}\mathbf{H} \delta\theta, \quad (3.16)$$

avec  $\delta\bar{\mathbf{y}} := \bar{\mathbf{y}} - \bar{\mathbf{y}}^*$ ,  $\delta\mathbf{u} := \mathbf{u} - \mathbf{u}_0^*$  et  $\delta\theta := \theta - \theta_0$ . Si  $p \geq q$ , la variation des paramètres incertains peut être déduite de  $\delta\bar{\mathbf{y}}$  et de  $\delta\mathbf{u}$  :

$$\delta\theta = (\nabla_{\theta}\mathbf{H})^+ [\delta\bar{\mathbf{y}} - \nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{H}\delta\mathbf{u}]. \quad (3.17)$$

De la même façon le gradient de la fonction coût s'obtient :

$$\nabla_{\mathbf{u}}\phi = \nabla_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^2\phi \delta\mathbf{u} + \nabla_{\mathbf{u}\theta}^2\phi \delta\theta, \quad (3.18)$$

ce qui, en injectant Eq. (3.17), permet de déduire une expression du gradient en fonction de  $\delta\bar{\mathbf{y}}$  et de  $\delta\mathbf{u}$  [78] :

$$\nabla_{\mathbf{u}}\phi = \nabla_{\mathbf{u}\theta}^2\phi (\nabla_{\theta}\mathbf{H})^+ \delta\bar{\mathbf{y}} + \left( \nabla_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^2\phi - \nabla_{\mathbf{u}\theta}^2\phi (\nabla_{\theta}\mathbf{H})^+ \nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{H} \right) \delta\mathbf{u}. \quad (3.19)$$

---

1. par souci de concision nous ne considérons dans le vecteur  $\theta$  que les paramètres incertains, pour éviter d'avoir à distinguer les paramètres connus des paramètres incertains

Nous avons proposé d'étendre simplement cette analyse à la sensibilité paramétrique des contraintes  $\mathbf{G}$ , en remarquant qu'en présence de contraintes les gradients de la fonction coût et des contraintes, i.e.  $\nabla_{\mathbf{u}}\phi(\mathbf{u}_0^*, \boldsymbol{\theta})$  et  $\nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{G}(\mathbf{u}_0^*, \boldsymbol{\theta})$ , respectivement n'étaient pas toujours nuls dans le cas nominal. Ainsi [65, 67] :

$$\begin{aligned}\nabla_{\mathbf{u}}\phi(\mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) &= \nabla_{\mathbf{u}}\phi(\mathbf{u}_0^*, \boldsymbol{\theta}_0) + \nabla_{\mathbf{u}\boldsymbol{\theta}}^2\phi(\nabla_{\boldsymbol{\theta}}\mathbf{H})^+ \delta\bar{\mathbf{y}} \\ &\quad + \left( \nabla_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^2\phi - \nabla_{\mathbf{u}\boldsymbol{\theta}}^2\phi(\nabla_{\boldsymbol{\theta}}\mathbf{H})^+ \nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{H} \right) \delta\mathbf{u}\end{aligned}\quad (3.20)$$

$$\begin{aligned}\nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{G}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) &= \nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{G}(\mathbf{u}_0^*, \boldsymbol{\theta}_0) + \nabla_{\mathbf{u}\boldsymbol{\theta}}^2\mathbf{G}(\nabla_{\boldsymbol{\theta}}\mathbf{H})^+ \delta\bar{\mathbf{y}} \\ &\quad + \left( \nabla_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^2\mathbf{G} - \nabla_{\mathbf{u}\boldsymbol{\theta}}^2\mathbf{G}(\nabla_{\boldsymbol{\theta}}\mathbf{H})^+ \nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{H} \right) \delta\mathbf{u},\end{aligned}\quad (3.21)$$

En résumé : on utilise (i) le modèle nominal pour évaluer les matrices  $\nabla_{\mathbf{u}\boldsymbol{\theta}}^2\phi$ ,  $\nabla_{\boldsymbol{\theta}}\mathbf{H}$ ,  $\nabla_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^2\phi$ ,  $\nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{H}$ ,  $\nabla_{\mathbf{u}\boldsymbol{\theta}}^2\mathbf{G}$ , et  $\nabla_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^2\mathbf{G}$  pour  $\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}_0$  et  $\mathbf{u} = \mathbf{u}_0^*$ , et (ii) les *mesures* du procédé obtenues à chaque fois que l'on atteint le régime permanent. On obtient donc à chaque itération  $k$  de RTO-MA les estimations des gradient suivantes [65, 67] :

$$\begin{aligned}\widehat{\nabla_{\mathbf{u}}\phi_p}(\mathbf{u}_k^*) &= \nabla_{\mathbf{u}}\phi(\mathbf{u}_0^*, \boldsymbol{\theta}_0) + \nabla_{\mathbf{u}\boldsymbol{\theta}}^2\phi(\nabla_{\boldsymbol{\theta}}\mathbf{H})^+ (\bar{\mathbf{y}}_{p,k} - \bar{\mathbf{y}}^*) \\ &\quad + \left( \nabla_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^2\phi - \nabla_{\mathbf{u}\boldsymbol{\theta}}^2\phi(\nabla_{\boldsymbol{\theta}}\mathbf{H})^+ \nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{H} \right) (\mathbf{u}_k^* - \mathbf{u}_0^*)\end{aligned}\quad (3.22)$$

$$\begin{aligned}\widehat{\nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{G}_p}(\mathbf{u}_k^*) &= \nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{G}(\mathbf{u}_0^*, \boldsymbol{\theta}_0) + \nabla_{\mathbf{u}\boldsymbol{\theta}}^2\mathbf{G}(\nabla_{\boldsymbol{\theta}}\mathbf{H})^+ (\bar{\mathbf{y}}_{p,k} - \bar{\mathbf{y}}^*) \\ &\quad + \left( \nabla_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^2\mathbf{G} - \nabla_{\mathbf{u}\boldsymbol{\theta}}^2\mathbf{G}(\nabla_{\boldsymbol{\theta}}\mathbf{H})^+ \nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{H} \right) (\mathbf{u}_k^* - \mathbf{u}_0^*),\end{aligned}\quad (3.23)$$

avec le symbole  $\widehat{(\cdot)}$  qui est utilisé pour indiquer une grandeur estimée.

### 3.3 Utilisation des mesures transitoires

RTO-MA est, dans sa formulation originale, une méthode d'optimisation statique particulièrement adaptée aux problèmes d'optimisation itérative des procédés chimiques en régime permanent. Ainsi, toutes les itérations  $k$  nécessitent que le procédé atteigne l'état stationnaire, ce qui, selon les procédés peut s'avérer long et rédhibitoire, voire inacceptable au niveau industriel. La Figure 3.1 illustre l'application typique de RTO-MA pour l'optimisation des procédés en régime permanent.

Nous avons donc proposé un cadre qui permet d'utiliser RTO-MA en utilisant les mesures du procédé *pendant le transitoire*, qui est décrit dans la sous-section suivante

#### 3.3.1 RTO-MA avec des mesures transitoires

On propose ici de procéder aux itérations de RTO-MA à intervalles de temps réguliers durant le transitoire. Si l'on indexe les instants de ré-optimisation par

“j”, le schéma pour obtenir  $\mathbf{u}_{j+1}^*$ , c’est à dire les entrées optimales qui seront uniformément appliquées au procédé entre  $t_j$  et  $t_{j+1}$  s’écrit :

$$\mathbf{u}_{j+1}^* := \arg \min_{\mathbf{u}} \phi_m(\mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) := \phi(\mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) + \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_j^\phi + \hat{\boldsymbol{\lambda}}_j^{\phi^T} (\mathbf{u} - \mathbf{u}_j^*) \quad (3.24)$$

$$\text{s.t.} \quad \mathbf{G}_m(\mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) := \mathbf{G}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) + \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_j^G + \hat{\boldsymbol{\lambda}}_j^{G^T} (\mathbf{u} - \mathbf{u}_j^*) \leq \mathbf{0} \quad (3.25)$$

$$\text{with} \quad \hat{\boldsymbol{\epsilon}}_j^\phi := \hat{\phi}_p(\mathbf{u}_j^*) - \phi(\mathbf{u}_j^*, \boldsymbol{\theta}) \quad (3.26)$$

$$\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_j^G := \hat{\mathbf{G}}_p(\mathbf{u}_j^*) - \mathbf{G}(\mathbf{u}_j^*, \boldsymbol{\theta}) \quad (3.27)$$

$$\hat{\boldsymbol{\lambda}}_j^{\phi^T} := \widehat{\nabla_{\mathbf{u}} \phi_p}(\mathbf{u}_j^*) - \nabla_{\mathbf{u}} \phi(\mathbf{u}_j^*, \boldsymbol{\theta}) \quad (3.28)$$

$$\hat{\boldsymbol{\lambda}}_j^{G^T} := \widehat{\nabla_{\mathbf{u}} \mathbf{G}_p}(\mathbf{u}_j^*) - \nabla_{\mathbf{u}} \mathbf{G}(\mathbf{u}_j^*, \boldsymbol{\theta}) , \quad (3.29)$$

avec la notation  $\widehat{(\cdot)}$  qui est utilisée pour chaque quantité qui, définie en régime permanent, doit être estimée, puisque pour chaque  $t_j$ , le régime permanent n’a pas encore été atteint.

La capacité de ce schéma à converger en un point KKT du procédé en un seul transitoire vers le régime permanent est résumée dans le théorème suivant :

### **Théorème 2**

*Soit le problème de RTO-MA qui utilise les mesures et les entrées calculées itérativement comme les solutions successives du problème (3.24-(3.29)). Si le procédé atteint le régime permanent et que les quantités estimées  $\hat{\phi}_p$ ,  $\hat{\mathbf{G}}_p$ ,  $\widehat{\nabla_{\mathbf{u}} \phi_p}$  et  $\widehat{\nabla_{\mathbf{u}} \mathbf{G}_p}$  convergent à leurs valeurs réelles, alors le procédé satisfait les NCOs (1.5).*

Le théorème et sa preuve ont été soumis et acceptés dans une version courte comme article de conférence [65] et dans une version étendue dans un journal [67].

### **3.3.2 Estimation durant le transitoire des modificateurs d’ordre 0 à l’état stationnaire**

Nous avons proposé d’utiliser directement les mesures en ligne des contraintes et de la fonction coût comme valeurs estimées de contraintes du procédé et du coût du procédé en régime stationnaire. Cette approche a l’avantage d’être consistante puisque si le système dynamique se stabilise, cette approximation devient exacte, i.e. les valeurs *mesurées* durant le transitoire tendent bien vers les valeurs stationnaires si le système se stabilise.

Ainsi, pour autant que l’on puisse mesurer la valeur instantanée des contraintes, le schéma suivant peut être utilisé pour estimer  $\boldsymbol{\epsilon}_j^G$  :

$$\hat{\boldsymbol{\epsilon}}_j^G = \mathbf{G}_p(t_j) - \mathbf{G}(\mathbf{u}_j^*, \boldsymbol{\theta}) . \quad (3.30)$$

Ainsi,  $\boldsymbol{\epsilon}_j^G$  est estimé à chaque instant  $t_j$  comme la différence entre la valeur courante *mesurée* des contraintes  $\mathbf{G}_p(t_j)$  et les valeurs *modélisées* des contraintes au

régime stationnaire prédit pour  $\mathbf{u}_j^*$ . Ce choix est motivé par le fait que quand  $t_j \rightarrow t_\infty$  et  $\mathbf{u}_j^* \rightarrow \mathbf{u}_\infty^*$ ,  $\mathbf{G}_p(t_\infty)$  correspond bien aux contraintes du procédé  $\mathbf{G}_p(\mathbf{u}_\infty^*)$  obtenues pour les entrées convergées  $\mathbf{u}_\infty^*$ .

De la même façon, pour autant que l'on puisse mesurer la valeur instantanée de la fonction coût, on peut estimer  $\hat{\epsilon}_j^\phi$  :

$$\hat{\epsilon}_j^\phi = \phi_p(t_j) - \phi(\mathbf{u}_j^*, \boldsymbol{\theta}). \quad (3.31)$$

### 3.3.3 Estimation durant le transitoire des modificateurs d'ordre 1 à l'état stationnaire

Pour estimer les modificateurs d'ordre 1, il convient d'estimer durant une phase transitoire, les gradients du procédé à l'état stationnaire. C'est une tâche difficile pour laquelle les méthodes de contrôle de gradient, ou de RTO par contrôle du gradient sont une bonne source d'inspiration. Nous avons effectué une comparaison de plusieurs de ces méthodes [118, 72].

#### Analogie avec les méthodes de contrôle de gradient

Les méthodes de RTO par contrôle de gradient sont des méthodes implicites (i.e. sans résolution directe du problème d'optimisation) d'optimisation, particulièrement adaptées aux cas non contraints qui proposent de reformuler le problème (1.1) comme un problème de contrôle en ligne. Dans le cas non-contraint, les conditions nécessaires d'optimalité se réduisent à  $\nabla_{\mathbf{u}} \phi_p(\mathbf{u}_p^*) = \mathbf{0}$ . Ainsi, la loi de commande suivante peut-être implantée pour conduire le procédé en un jeu de conditions opératoires pour lesquelles le gradient serait nul :

$$\dot{\mathbf{u}}(t) = -\kappa \mathbf{P}^{-1} \boldsymbol{\Gamma}_\phi(t), \quad \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0, \quad (3.32)$$

avec  $\kappa$  qui représente le gain matriciel du contrôleur,  $\mathbf{P}$  une estimation du Hessian de la fonction coût,  $\boldsymbol{\Gamma}_\phi(t)$  un signal temporel qui estime le gradient de la fonction coût du procédé *en régime permanent*. Plusieurs méthodes existent pour implanter (3.32), qui diffèrent principalement sur la façon dont  $\boldsymbol{\Gamma}_\phi(t)$  est obtenu. Dans [118, 72], nous avons étudié et comparé plusieurs méthodes de contrôle du gradient, qui incorporent toutes une méthode différente d'estimation du gradient en régime stationnaire sur la base de mesures transitoires.

Trois de ces méthodes sont basées sur le modèle :

1. Calcul du gradient par adaptation du modèle : il s'agit de l'approche classique two-step (AM), pour laquelle les différences entre les mesures transitoires et les prédictions correspondantes par le modèle sont utilisées pour adapter les paramètres du modèle. Le modèle ainsi adapté est utilisé ensuite pour adapter l'estimation du gradient en régime stationnaire.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\boldsymbol{\theta}}(t)}{\partial t} &= k_\theta (\nabla_{\boldsymbol{\theta}} \mathbf{H})^+ \Big|_{\mathbf{u}(t), \hat{\boldsymbol{\theta}}(t)} \left( \mathbf{y}_p(t) - \mathbf{H}(\mathbf{u}(t), \hat{\boldsymbol{\theta}}(t)) \right), \quad \hat{\boldsymbol{\theta}}(0) = \boldsymbol{\theta}_0 \\ \boldsymbol{\Gamma}_\phi(t) &= (\nabla_{\mathbf{u}} \phi) \Big|_{\mathbf{u}(t), \hat{\boldsymbol{\theta}}(t)} \end{aligned} \quad (3.33)$$

avec  $\hat{\theta}$  qui représente les paramètres identifiés et  $k_\theta$  le gain d'adaptation. Ici, le problème d'identification récursive des paramètres est écrit en temps continu, comme une équation différentielle [93], ce qui est justifié par la séparation d'échelle de temps entre le procédé et l'estimation des paramètres. Cela pénalise le temps de convergence, mais il est clair que si l'incertitude est connue et n'est que de nature paramétrique cette approche à le potentiel nécessaire pour converger aux gradients idéaux [118, 72],.

2. Calcul de  $\Gamma_\phi(t)$  par la méthode de “Self-Optimizing Control” (SOC, [2]) qui utilise la matrice de sensibilité des entrées et des sorties optimales du modèle par rapport aux paramètres du modèle.
3. Calcul du gradient par la méthode de Neighboring Extremals (NEC) [78], déjà discutée.

Les deux autres méthodes sont basées uniquement sur les mesures. Pour les méthodes basées sur les mesures, il est nécessaire de perturber le procédé pour extraire l'information sur le gradient. Ce n'est pas nécessaire avec les méthodes basées sur le modèle, puisque c'est le modèle du procédé qui fournit cette information.

1. “Extremum-Seeking Control” (ESC) : Avec ESC, un signal d'excitation sinusoïdale est ajouté à  $\mathbf{u}(t)$  et le gradient est estimé par corrélation [3, 92]. Trois séparations d'échelle de temps sont requises pour que la méthode puisse converger. Il a été montré dans [118, 72] que cela pénalisait fortement le temps de convergence, d'autant plus que dans le cas multivariable, chaque entrée doit être perturbée avec son propre signal sinusoïdal.
2. “Multiple Units” (MU) [116] : Pour cette méthode, on suppose l'existence d'un minimum de  $n_u + 1$  unités identiques du procédé. C'est la faiblesse principale de la méthode qui restreint son applicabilité à des systèmes tels que les piles à combustible ou les microréacteurs, i.e. les systèmes pour lesquels il est envisageable de disposer de plusieurs installations. Cependant d'un point de vue méthodologique cette méthode est intéressante en ce qu'elle n'utilise rien d'autre que les mesures en ligne des contraintes et de la fonction coût.

Nous avons aussi étudié l'approche par différences finies classique (FD), où il est nécessaire de perturber les entrées individuellement, l'une après l'autre et d'attendre à chaque fois l'atteinte du régime stationnaire pour calculer le gradient par différences finies. Cette approche n'utilise pas les mesures transitoires mais a servi de référence dans [118, 72] puisque c'est la méthode la plus facile à mettre en œuvre et la plus intuitive.

Ainsi la littérature des méthodes de contrôle du gradient est riche de méthodes d'estimation de gradient en régime stationnaire, même si ces méthodes sont parfois directement intégrées à la loi de commande 3.32 et sont, de ce fait, plus difficiles à identifier. En appliquant RTO-MA en ligne, durant le transitoire, on espère bénéficier de la capacité de RTO-MA à converger en un optimum du procédé sans connaissance supplémentaire sur la solution optimale (par ex. ensemble de contraintes actives à l'optimum), en un seul transitoire. Ainsi implanté

RTO-MA se comporterait “comme un contrôleur de gradient”, avec la propriété supplémentaire de pouvoir gérer les contraintes sans hypothèses sur la solution optimale. Néanmoins remarquons que :

- Dans le cas multivariable, i.e.  $n_u > 1$ , ESC, déjà pénalisé par les diverses séparations d’échelle de temps, sera pénalisé par les différences entre les fréquences d’excitation des signaux de perturbations appliqués à chacune des entrées. Le temps de convergence est aussi pénalisé lorsque ESC est appliqué en présence de contraintes [48, 79].
- SOC postule que le problème d’optimisation est sans contraintes, ou que dans le cas contraire, l’ensemble des contraintes actives est connu et ne change pas avec l’incertitude. Ainsi, un certain nombre d’entrées sont dédiées au contrôle des contraintes actives et le problème de contrôle de gradient de 3.32 se résume donc à un problème de contrôle de gradient *réduit*.
- L’extension des méthodes de contrôle de gradient aux cas contraints est une idée ancienne [4], récemment revisitée [51]. Certains travaux proposent d’utiliser directement la condition de faisabilité duale des conditions de KKT (i.e. la deuxième ligne de l’équation 1.5) pour construire une loi de commande qui puisse converger à un extremum local sans connaissance de l’ensemble des contraintes actives. Cependant, ces études concernent des problèmes d’optimisation numériques classiques en l’absence d’incertitude.
- Pour l’ensemble des raisons susmentionnées, ni SOC (gestion des contraintes), ni ESC (temps de convergence), ni FD ne semblent adaptées.

Nous avons donc proposé deux extensions : une extension de NEC pour utiliser les mesures transitoires et une extension (immédiate) de MU aux cas contraints.

### **Estimation en ligne des modificateurs d’ordre 1 à l’état stationnaire avec NE**

Nous avons proposé d’utiliser les mesures des sorties  $\delta \mathbf{y}_p(t_j) = \mathbf{y}_p(t_j) - \bar{\mathbf{y}}^*$  et les valeurs courantes des entrées  $\delta \mathbf{u}^*(t_j) = \mathbf{u}_j^* - \mathbf{u}_0^*$  pour estimer les gradients du procédé, de façon similaire à ce qui a été proposé précédemment (Eqns (3.22-3.23)). La différence est que l’on propose d’utiliser les mesures transitoires en lieu et place des mesures en régime stationnaire, comme dans le cas de l’estimation des modificateurs d’ordre 0. Il suffit ensuite de retrancher à ces gradients estimés les *gradients du modèle en régime stationnaire, évalués pour les mêmes valeurs des variables d’entrées  $\mathbf{u}_j^*$* , i.e. les valeurs prédites des gradients par le modèle pour l’état stationnaire obtenu pour  $\mathbf{u} = \mathbf{u}_j^*$ , pour obtenir un estimateur des modificateurs d’ordre 1 consistant. En effet, quand le procédé atteint le régime stationnaire les incréments  $\delta \mathbf{y}_p(t_j)$  and  $\delta \mathbf{u}^*(t_j)$  correspondent aux valeurs classiques  $\delta \mathbf{y}$  et  $\delta \mathbf{u}$ , et l’estimateur est donc en régime stationnaire de la même

qualité que celui des équations (3.22-3.23). Ainsi :

$$\begin{aligned}\hat{\lambda}_j^{\phi^T} &= \nabla_{\mathbf{u}}\phi(\mathbf{u}_0^*, \boldsymbol{\theta}_0) + \nabla_{\mathbf{u}\boldsymbol{\theta}}^2\phi(\nabla_{\boldsymbol{\theta}}\mathbf{H})^+ \delta\mathbf{y}_p(t_j) \\ &\quad + \left(\nabla_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^2\phi - \nabla_{\mathbf{u}\boldsymbol{\theta}}^2\phi(\nabla_{\boldsymbol{\theta}}\mathbf{H})^+ \nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{H}\right)\delta\mathbf{u}^*(t_j) - \nabla_{\mathbf{u}}\phi(\mathbf{u}_j^*, \boldsymbol{\theta})\end{aligned}\quad (3.34)$$

$$\begin{aligned}\hat{\lambda}_j^{G^T} &= \nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{G}(\mathbf{u}_0^*, \boldsymbol{\theta}_0) + \nabla_{\mathbf{u}\boldsymbol{\theta}}^2\mathbf{G}(\nabla_{\boldsymbol{\theta}}\mathbf{H})^+ \delta\mathbf{y}_p(t_j) + \\ &\quad \left(\nabla_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^2\mathbf{G} - \nabla_{\mathbf{u}\boldsymbol{\theta}}^2\mathbf{G}(\nabla_{\boldsymbol{\theta}}\mathbf{H})^+ \nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{H}\right)\delta\mathbf{u}^*(t_j) - \nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{G}(\mathbf{u}_j^*, \boldsymbol{\theta})\end{aligned}\quad (3.35)$$

### Estimation en ligne des modificateurs d'ordre 1 à l'état stationnaire avec MU

Supposons l'existence de  $n_u + 1$  unités identiques pour lesquelles le coût et les contraintes sont mesurées pendant le transitoire. On utilise l'indice  $a$  pour indiquer l'unité principale – celle à laquelle les entrées calculées par RTO-MA sont appliquées. Les  $n_u$  unités restantes sont indexées par  $i \in [1; n_u]$ .

À chaque instant  $t_j$ ,  $\mathbf{u}_j^*$  est appliquée à l'unité "a", alors que la  $i^{eme}$  unité se voit appliquer les entrées :

$\mathbf{u}_{j,i}^* = [u_{j,1}^* \dots u_{j,i-1}^* \quad u_{j,i}^* + \Delta \quad u_{j,i+1}^* \dots u_{j,n_u}^*]^T$ . En d'autres termes la  $i^{eme}$  composante du vecteur  $\mathbf{u}_j^*$  subit un offset de  $\Delta$ .

Si  $\phi_{p,a}(t_j)$  et  $\mathbf{G}_{p,a}(t_j)$  représentent les valeurs mesurées à chaque instant  $t_j$  du coût et des contraintes de l'unité principale, et  $\phi_{p,i}(t_j)$  ainsi que  $\mathbf{G}_{p,i}(t_j)$  les quantités correspondantes pour chaque unité  $i$ ,  $i \in [1; n_u]$ , les éléments de chaque gradient du procédé peuvent être estimés par différences finies entre les unités :

$$\Gamma_{\phi_i}(t_j) = \widehat{\nabla_{u_i}\phi_p}(\mathbf{u}_j^*) = \frac{\phi_{p,i}(t_j) - \phi_{p,a}(t_j)}{\Delta} \quad (3.36)$$

$$\Gamma_{G_i^h}(t_j) = \widehat{\nabla_{u_i}G_p^h}(\mathbf{u}_j^*) = \frac{G_{p,i}^h(t_j) - G_{p,a}^h(t_j)}{\Delta}, \quad (3.37)$$

avec  $\widehat{\nabla_{u_i}\phi_p}(\mathbf{u}_j^*)$  qui est la  $i^{eme}$  coordonnée du vecteur  $\widehat{\nabla_{\mathbf{u}}\phi_p}(\mathbf{u}_j^*)$ ,  $h \in [1; n_G]$  le compteur de contraintes, et  $\widehat{\nabla_{u_i}G_p^h}(\mathbf{u}_j^*)$  le  $(h, i)^{eme}$  élément de la matrice  $\widehat{\nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{G}_p}(\mathbf{u}_j^*)$ .

Cette extension est en fait une généralisation de MU [116], pour laquelle les gradients des contraintes et du coût sont estimés simultanément. L'estimation des gradients des contraintes n'est pas dans la formulation originale de MU, dédiée aux problèmes sans contraintes.

## 3.4 Exemple illustratif

Dans cette section, l'utilisation d'approximations convexes et l'implantation de RTO-MA sur la base de mesures transitoires est illustré au moyen d'un réacteur chimique simulé qui décrit la chimie du diketène telle que mise en œuvre par la compagnie Lonza [118, 72].



### 3.4.1 Modèle dynamique du réacteur

Les réactions  $A + B \rightarrow C$  et  $2B \rightarrow D$  sont mise en œuvre dans un réacteur continu parfaitement agité, avec  $C$  le produit désiré. Les entrées manipulables sont les débits d'alimentation de  $A$  et  $B$ . La conservation de la matière et de l'énergie permet d'établir le modèle :

$$\dot{c}_A(t) = -k_1 c_A(t) c_B(t) + \frac{u_A(t)}{V} c_{Ain} - \left( \frac{u_A(t) + u_B(t)}{V} \right) c_A(t) \quad (3.38)$$

$$\dot{c}_B(t) = -k_1 c_A(t) c_B(t) - 2 k_2 c_B^2(t) + \frac{u_B(t)}{V} c_{Bin} - \left( \frac{u_A(t) + u_B(t)}{V} \right) c_B(t) \quad (3.39)$$

$$\dot{c}_C(t) = k_1 c_A(t) c_B(t) - \left( \frac{u_A(t) + u_B(t)}{V} \right) c_C(t) \quad (3.40)$$

$$\dot{c}_D(t) = k_2 c_B^2(t) - \left( \frac{u_A(t) + u_B(t)}{V} \right) c_D(t) \quad (3.41)$$

$$Q(t) = V k_1 c_A(t) c_B(t) (-\Delta H_{r,1}) + V k_2 c_B^2(t) (-\Delta H_{r,2}), \quad (3.42)$$

avec  $c_X$  les concentrations des espèces  $X$ ,  $V$  le volume,  $u_A$  et  $u_B$  les débits d'alimentation en  $A$  et  $B$ ,  $Q$  l'énergie totale générée par les deux réactions exothermiques,  $\Delta H_{r,1}$  et  $\Delta H_{r,2}$  les enthalpies réactionnelles,  $c_{Ain}$  et  $c_{Bin}$  les concentrations de  $A$  et  $B$  dans les flux d'alimentation, et  $k_1$  et  $k_2$  les constantes cinétiques des deux réactions. Les valeurs numériques des paramètres du modèle nominal sont données dans le tableau 3.1.

### 3.4.2 Problème d'optimisation

On désire maximiser les performances en régime stationnaire en manipulant l'alimentation en  $A$  et en  $B$ . Le problème d'optimisation statique s'écrit donc :

$$\max_{\bar{u}_A, \bar{u}_B} J := \frac{\bar{c}_C^2 (\bar{u}_A + \bar{u}_B)^2}{\bar{u}_A c_{Ain}} - w (\bar{u}_A^2 + \bar{u}_B^2) \quad (3.43)$$

$$\text{s.t.} \quad -k_1 \bar{c}_A \bar{c}_B + \frac{\bar{u}_A}{V} c_{Ain} - \left( \frac{\bar{u}_A + \bar{u}_B}{V} \right) \bar{c}_A = 0$$

$$-k_1 \bar{c}_A \bar{c}_B - 2 k_2 \bar{c}_B^2 + \frac{\bar{u}_B}{V} c_{Bin} - \left( \frac{\bar{u}_A + \bar{u}_B}{V} \right) \bar{c}_B = 0$$

$$k_1 \bar{c}_A \bar{c}_B - \left( \frac{\bar{u}_A + \bar{u}_B}{V} \right) \bar{c}_C = 0$$

$$k_2 \bar{c}_B^2 - \left( \frac{\bar{u}_A + \bar{u}_B}{V} \right) \bar{c}_D = 0$$

$$\bar{Q} = V k_1 \bar{c}_A \bar{c}_B (-\Delta H_{r,1}) + V k_2 \bar{c}_B^2 (-\Delta H_{r,2})$$

$$G_1 := \frac{\bar{Q}}{Q_{max}} - 1 \leq 0 \quad (3.44)$$

$$G_2 := \frac{\bar{D}}{D_{max}} - 1 \leq 0 \quad (3.45)$$

$$0 \leq \bar{u}_A \leq u_{max} \quad (3.46)$$

$$0 \leq \bar{u}_B \leq u_{max}, \quad (3.47)$$

avec  $\overline{(\cdot)}$  qui indique une valeur en régime stationnaire et  $\overline{D} := \frac{\overline{c}_D}{\overline{c}_A + \overline{c}_B + \overline{c}_C + \overline{c}_D}$  la fraction molaire en régime stationnaire de  $D$ . La fonction objectif  $J$  représente la productivité en  $C$ , le terme  $w(\overline{u}_A^2 + \overline{u}_B^2)$  (avec  $w$  reprénstant un terme de pondération) pénalisant une trop forte sollicitation des alimentations en  $A$  et  $B$ . Les différentes bornes et valeurs numériques utilisées sont résumées dans le tableau 3.2.

$k_1$	0.75	$\frac{1}{\text{mol min}}$
$k_2$	1.5	$\frac{1}{\text{mol min}}$
$c_{Ain}$	2	$\frac{\text{mol}}{\text{mol min}}$
$c_{Bin}$	1.5	$\frac{\text{mol}}{\text{mol min}}$
$V$	500	l
$(-\Delta H_{r,1})$	3.5	$\frac{\text{kcal}}{\text{mol}}$
$(-\Delta H_{r,2})$	1.5	$\frac{\text{kcal}}{\text{mol}}$

TABLE 3.1 – Valeurs nominales des paramètres du modèle

$w$	0.004	$\frac{\text{mol min}}{\text{l}^2}$
$Q_{max}$	110	kcal
$D_{max}$	0.1	—
$u_{max}$	50	$\frac{1}{\text{min}}$

TABLE 3.2 – Paramètres du problème d’optimisation

Le problème (3.43)-(3.47) est approché par le problème convexe suivant – par application de la méthode décrite dans la section 3.2.2 :

$$\min_{\mathbf{u}} \quad \phi_c(\mathbf{u}) := \phi^* + [a_\phi \ b_\phi](\mathbf{u} - \mathbf{u}^*) + \frac{1}{2}(\mathbf{u} - \mathbf{u}^*)^T \mathbf{Q}_\phi(\mathbf{u} - \mathbf{u}^*) \quad (3.48)$$

$$\text{s.t.} \quad G_{1,c}(\mathbf{u}) := G_1(\mathbf{u}^*) + [a_{G_1} \ b_{G_1}](\mathbf{u} - \mathbf{u}^*) \leq 0 \quad (3.49)$$

$$G_{2,c}(\mathbf{u}) := G_2(\mathbf{u}^*) + [a_{G_2} \ b_{G_2}](\mathbf{u} - \mathbf{u}^*) \leq 0 \quad (3.50)$$

$$0 \leq \overline{u}_A \leq u_{max} \quad (3.51)$$

$$0 \leq \overline{u}_B \leq u_{max}, \quad (3.52)$$

Ici les valeurs propres minimales de  $\mathbf{Q}_\phi$  ont été fixées arbitrairement à 0.08. Les résultats de la régression convexe sont résumés dans le tableau 3.3.

### 3.4.3 Optimisation nominale vs. optimisation du procédé

On considère ici, que comme le modèle, le “vrai procédé” suit les équations (3.38)-(3.42). De l’incertitude est considérée pour trois paramètres :  $c_{Ain,p} = 2.5 \frac{\text{mol}}{\text{l}}$ ,  $k_{1,p} = 1.4 \frac{1}{\text{mol min}}$  et  $k_{2,p} = 0.4 \frac{1}{\text{mol min}}$ . Les valeurs réelles de ces trois paramètres sont donc sensiblement différentes des valeurs nominales.

$a_\phi$	-0.8305	$b_\phi$	-0.9121
$a_{G_1}$	0.0051	$b_{G_1}$	0.0126
$a_{G_2}$	-0.0643	$b_{G_2}$	0.0857
$\mathbf{Q}_\phi =$		0.08   0 0   0.08	

TABLE 3.3 – Paramètres de l’approximation convexe

Solution nominale			Optimum du procédé		
$u_A^*$	14.52	$\frac{1}{\min}$	$u_{A,p}^*$	17.20	$\frac{1}{\min}$
$u_B^*$	14.90	$\frac{1}{\min}$	$u_{B,p}^*$	30.30	$\frac{1}{\min}$
$J(\mathbf{u}^*) = -\phi^*$	4.51	$\frac{\text{mol}}{\min}$	$J_p(\mathbf{u}_p^*) = -\phi_p^*$	15.42	$\frac{\text{mol}}{\min}$
$G_1(\mathbf{u}^*) = \frac{Q^*}{Q_{max}} - 1$	-0.48	—	$G_{1,p}(\mathbf{u}_p^*) = \frac{Q_p^*}{Q_{max}^*} - 1$	0	—
$G_2(\mathbf{u}^*) = \frac{D^*}{D_{max}} - 1$	0	—	$G_{2,p}(\mathbf{u}_p^*) = \frac{D_p^*}{D_{max}^*} - 1$	-0.19	—

TABLE 3.4 – Solutions du problème nominal (gauche) et du problème d’optimisation pour le procédé (droite)

Les solutions nominales et réelles du problème d’optimisation sont données dans le tableau 3.4. Les entrées optimales, la valeur de la fonction coût et l’ensemble des contraintes actives sont différents. Ainsi le modèle prévoit que  $G_1$  est inactive est  $G_2$  active, alors qu’à l’optimum réel, c’est le contraire..

#### 3.4.4 RTO-MA de régime permanent en régime permanent

RTO-MA est tout d’abord appliqué dans sa forme classique, i.e. celle des équations (2.8)-(2.13). On illustre en premier l’impact de l’utilisation de l’approximation convexe, en appliquant RTO-MA avec le modèle détaillé des équations (3.38)-(3.42) et les paramètres nominaux, puis avec l’approximation convexe. On considère ici que les gradients expérimentaux sont mesurés dans un cas idéal, sans bruit de mesure, ou que leur estimation est parfaite, i.e.  $\widehat{\nabla_{\mathbf{u}} \mathbf{G}_p}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\theta})_k = \nabla_{\mathbf{u}} \mathbf{G}_p(\mathbf{u}_k^*)$  et  $\widehat{\nabla_{\mathbf{u}} \phi_p}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\theta})_k = \nabla_{\mathbf{u}} \phi_p(\mathbf{u}_k)$ . La convergence à l’optimum du procédé est effective (Figure 3.2) :

- après 4 itérations, de régime permanent à régime permanent, lorsque l’approximation convexe du modèle détaillée est utilisée,
- après 6 itérations, de régime permanent à régime permanent, lorsque le modèle détaillé est utilisé.

Ainsi non seulement RTO-MA fonctionne avec l’approximation convexe – malgré l’erreur structurelle ajoutée par l’approximation, puisque le modèle détaillé n’est pas convexe –, mais de plus, le nombre d’itérations que l’on pourrait penser systématiquement augmenter (puisque le modèle approché est supposé moins

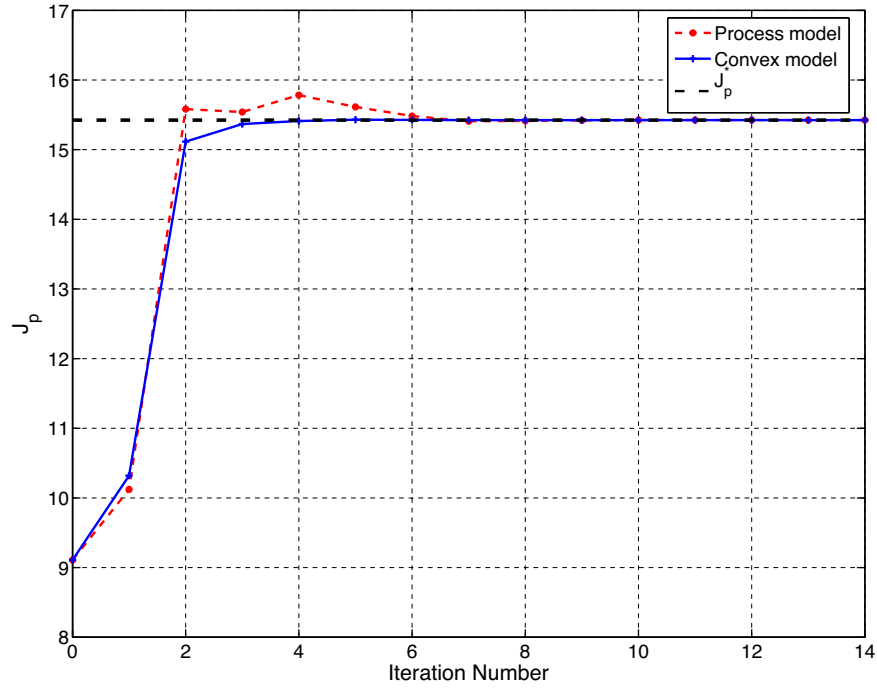


FIGURE 3.2 – Evolution de la fonction coût du procédé avec RTO-MA.

précis que le modèle détaillé), est même réduit.

### 3.4.5 RTO-MA sur la base de mesures transitoires

Dans cette section, RTO-MA est appliqué avec les mesures transitoires, i.e. avec l'approche des équations (3.24-3.29).

#### Utilisation des gradients idéaux

En appliquant RTO-MA avec le modèle convexe, durant le transitoire (en résolvant le problème toutes les  $\tau_{RTO} = 60$  min, ce qui est une bonne approximation du temps de stabilisation du procédé), on obtient sensiblement les mêmes résultats que dans la sous-section précédente : une convergence en 240 minutes, qui correspond aux 4 itérations susmentionnées (Figure 3.3). Dans un premier temps, on suppose que l'on dispose des gradients idéaux, i.e.  $\widehat{\nabla_{\mathbf{u}}\phi_p}(\mathbf{u}_j^*) = \nabla_{\mathbf{u}}\phi_p(\mathbf{u}_j^*)$  et  $\widehat{\nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{G}_p}(\mathbf{u}_j^*) = \nabla_{\mathbf{u}}\mathbf{G}_p(\mathbf{u}_j^*)$ .

Notons que la figure 3.4 illustre que l'ensemble des contraintes actives est correctement déterminé

En réduisant  $\tau_{RTO}$ , le temps de convergence diminue. Ainsi, avec  $\tau_{RTO} = 30$  min et  $\tau_{RTO} = 5$  min, on obtient 120 min et 70 min comme temps de

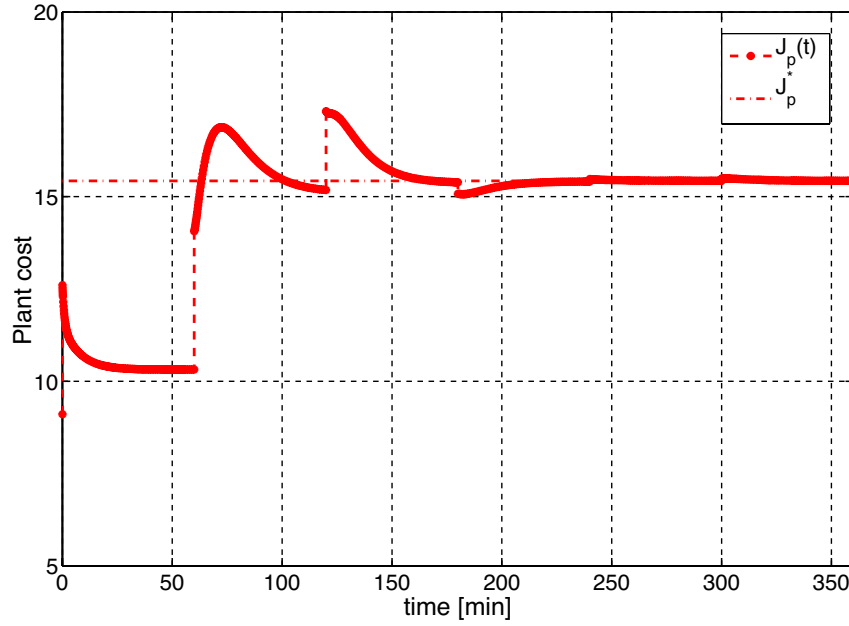


FIGURE 3.3 – Evolution de la fonction coût du procédé avec RTO-MA, sur la base des mesures transitoires, avec un modèle approché convexe,  $\tau_{RTO} = 60$  min et les gradients idéaux.

convergence, respectivement. Finalement, avec  $\tau_{RTO} = 1$  min, la convergence à l'optimum réel du procédé est obtenue après 60 min, c'est à dire l'équivalent d'une seule itération de régime stationnaire à régime stationnaire, soit 4 fois plus rapidement que dans la configuration classique de RTO-MA, comme illustré par la figure 3.6.

Les discontinuités de la fonction coût et des contraintes sont évidemment dues aux changements abrupts de  $u_A$  et  $u_B$  à chaque résolution du problème d'optimisation (Figure 3.5).

### Gradients calculés avec NE

Nous utilisons ici toujours l'approximation convexe du modèle et les équations (3.26-3.27) pour estimer les modificateurs d'ordre 0, mais les gradients sont à présent calculés avec les équations (3.22-3.23). Pour construire les matrices nominales, il convient d'utiliser le modèle détaillé de l'équation (3.43). 2% de bruit blanc de mesure est ajouté aux mesures de sorties, i.e. les concentrations des 4 espèces. La qualité de la convergence dépend bien sûr de celle de la linéarisation, puisque NE est une méthode qui permet de construire un estimateur de gradients sur la base de la linéarisation des conditions d'optimalité autour des entrées nominales. Avec  $\tau_{RTO} = 1$  min, la convergence au voisinage du coût optimal du procédé est obtenues après 40 min, comme illustré par la figure 3.7.

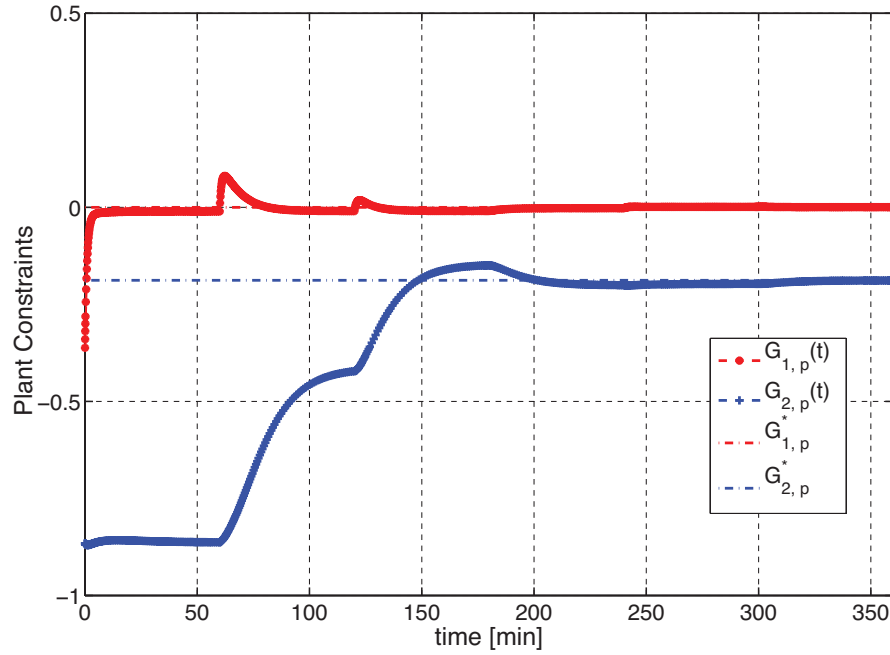


FIGURE 3.4 – Evolution des contraintes du procédé avec RTO-MA, sur la base des mesures transitoires, avec un modèle approché convexe,  $\tau_{RTO} = 60$  min et les gradients idéaux.

Notons finalement que le temps de convergence observé est du même ordre de grandeur que celui obtenu dans le cas non-constraint, lorsque NE est utilisé pour construire un contrôleur de gradient [72].

### Gradients calculés avec MU

On utilise à présent MU pour estimer les gradients du coût et des contraintes. 3 unités sont considérées puisque  $n_u = 2$ . Les mesures sont supposées non bruitées par souci de simplicité. La présence de bruit de mesure est un facteur limitant MU dans le cas général, car les unités doivent être identiques, et subir ainsi la même réalisation de bruit de mesure, même si de récents progrès nuancent cette observation [111, 123, 124]. Néanmoins, MU reste conceptuellement une approche intéressante qui ne nécessite pas de mesures autres que celles contraintes et de la fonction coût.

La figure 3.8 illustre que la convergence à l'optimum du procédé est obtenue après une centaine de minutes, ce qui encore une fois est comparable aux résultats obtenus en l'absence de contraintes, pour le même réacteur, lorsque MU est utilisé pour construire un contrôleur de gradient.

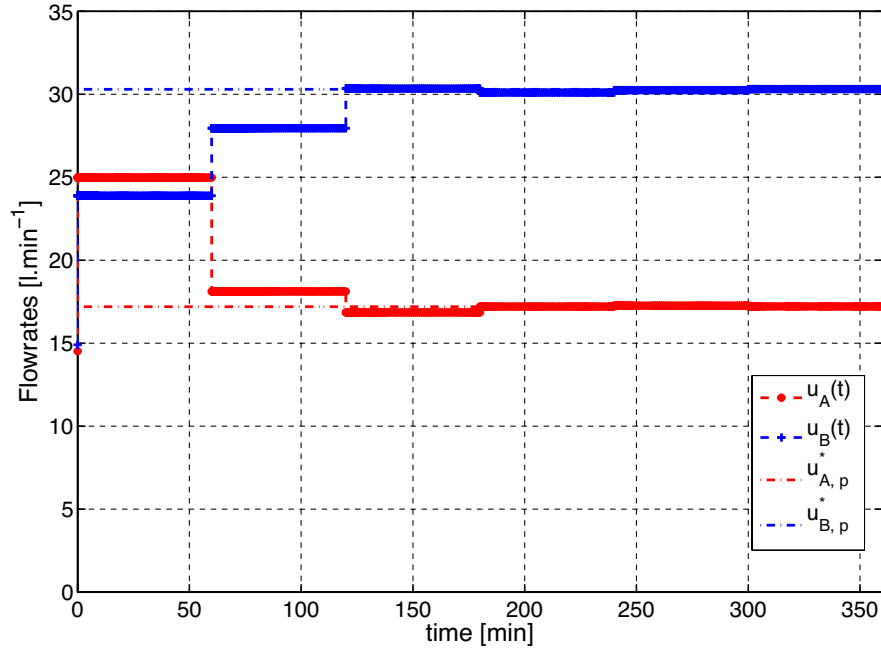


FIGURE 3.5 – Evolution des entrées avec RTO-MA, sur la base des mesures transitoires, avec un modèle approché convexe,  $\tau_{RTO} = 60$  min et les gradients idéaux.

### 3.5 RTO-MA quand les entrées du modèle diffèrent des entrées du procédé réel

Le cas où le modèle et le procédé ne partagent pas les mêmes entrées manipulables peut sembler marginal. C'est pourtant un cas plus fréquent qu'on ne l'imagine qui apparaît au moins dans deux cas pratiques. Tout d'abord, dans le cas des procédés présentant une ou plusieurs boucle(s) de recyclage il est parfois nécessaire de "couper" des flux, et de considérer les flux coupés comme des degrés de liberté pour résoudre le modèle de façon séquentielle, plutôt que simultanée. Ensuite on considère fréquemment lorsque l'on construit un modèle que l'on manipule directement une grandeur d'entrée, par exemple un débit. En pratique cette manipulation est effectuée de façon indirecte et le réel degré de liberté de l'opérateur est une valeur de consigne d'un contrôleur, dont on ne connaît pas toujours les paramètres. C'est au travers d'une série de projets avec Tridel, l'usine d'incinération des déchets de Lausanne (qui sert à la production d'électricité et de chauffage à distance) que nous avons été confronté à ces deux situations pour la première fois. Dans le cadre de la thèse de Sean Costello (TD2), que je co-encadre avec le Professeur Bonvin, nous avons récemment proposé une approche pour traiter ce cas.

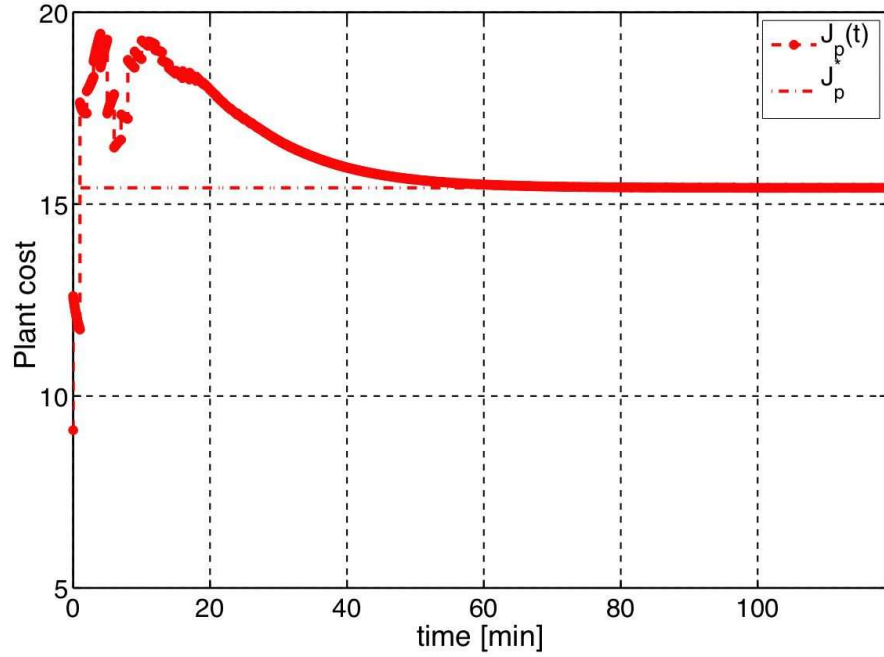


FIGURE 3.6 – Evolution de la fonction coût du procédé avec RTO-MA, sur la base des mesures transitoires, avec un modèle approché convexe,  $\tau_{RTO} = 1$  min et les gradients idéaux.

Pour ce problème de simulation et d'optimisation de l'usine de Tridel, dont le principe est présenté de façon succincte dans la figure 3.9 :

les degrés de liberté du procédé sont différents de ceux du modèle, comme on peut le voir dans la figure 3.10 : Pour le modèle, il a été choisi d'utiliser comme entrées  $\mathbf{u}$  les températures et les débits massiques et A et B, et en A, B, et C, respectivement, pour pouvoir simuler ce cycle complexe de façon séquentielle. Par contre l'opérateur manipule uniquement les grandeurs notées  $\mathbf{c}$ , i.e. les pressions en A et B, qui du point de vue du modèle sont entièrement déterminées par le choix de  $\mathbf{u}$ .

Pour résoudre ce type de problématique sans avoir à redévelopper le modèle, RTO-MA a été généralisée et est à présent implantable même si l'on conserve  $\mathbf{u}$  comme degrés de liberté du problème d'optimisation [42].

Pour cela on doit supposer que :

1. La fonction coût du procédé  $\phi_p(\mathbf{c})$  dépend des  $n_c$  entrées du procédé  $\mathbf{c}$ .
2. Le modèle de la fonction coût  $\phi(\mathbf{u})$  a  $n_u$  entrées  $\mathbf{u}$ , avec  $n_u \geq n_c$ .
3. Un modèle  $\mathbf{c}(\mathbf{u})$  exprimant le mapping de  $\mathbf{u}$  à  $\mathbf{c}$  est disponible.

Si ces trois conditions sont satisfaites on propose de résoudre à la  $k^{eme}$  itération, le problème d'optimisation suivant :



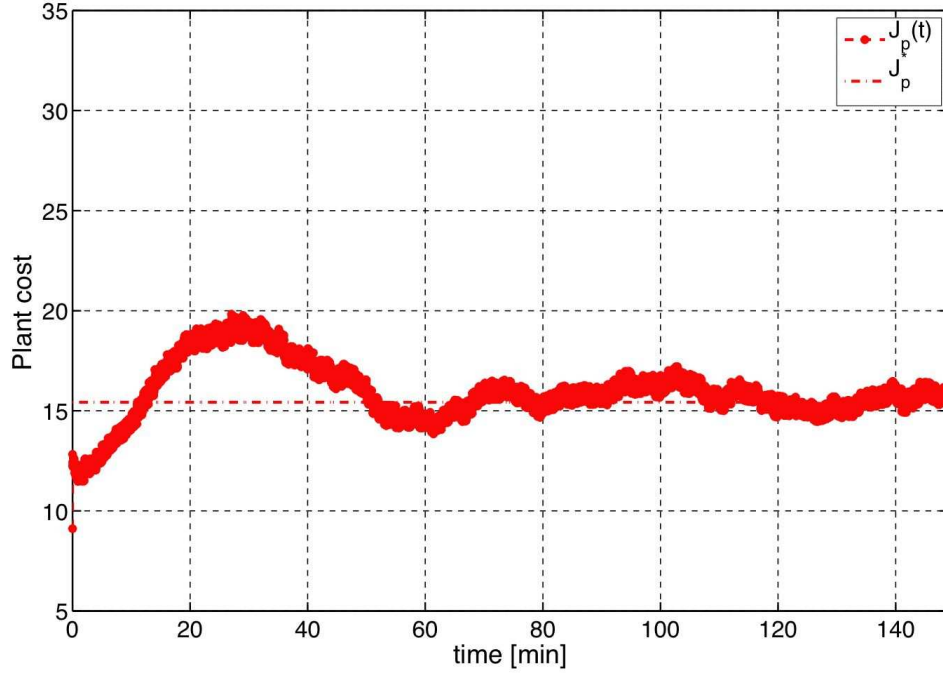


FIGURE 3.7 – Evolution de la fonction coût du procédé avec RTO-MA, sur la base des mesures transitoires,  $\tau_{RTO} = 1$  min et des gradients estimés par NE.

*RTO-MA généralisé : cas sans contraintes*

$$\mathbf{u}_{k+1}^* := \operatorname{argmin} \phi(\mathbf{u}) + \boldsymbol{\lambda}_k^T (\mathbf{c}(\mathbf{u}) - \mathbf{c}(\mathbf{u}_k^*)), \quad (3.53)$$

$$\mathbf{c}_{k+1} := \mathbf{c}(\mathbf{u}_{k+1}^*), \quad (3.54)$$

$$\text{with } \boldsymbol{\lambda}_k^T = \nabla_{\mathbf{c}} \phi_p(\mathbf{c}(\mathbf{u}_k^*)) - \nabla_{\mathbf{u}} \phi(\mathbf{u}_k^*) (\nabla_{\mathbf{u}} \mathbf{c}(\mathbf{u}_k^*))^+ \quad (3.55)$$

avec  $(.)^+$  qui indique le Moore-Penrose pseudo inverse.

Comme on le voit, le problème permet de déterminer  $\mathbf{c}_{k+1}^*$  connaissant  $\mathbf{u}_k^*$  et les gradients du procédé  $\nabla_{\mathbf{c}} \phi_p(\mathbf{c}_k)$ , par rapport aux degrés de liberté du procédé, la multiplication à droite par le pseudo-inverse permettant de “passer” de l’espace des  $\mathbf{u}$  à l’espace des  $\mathbf{c}$  pour le calcul du gradient du modèle.

A noter qu’il est démontré que les propriétés de convergence de RTO-MA à un optimum du procédé réel sont préservées dans ce cas non-contraint. L’extension de la preuve aux cas contraints a été acceptée pour publication lors du congrès mondial de l’IFAC [44], et l’ensemble des résultats, étendus donnera vraisemblablement lieu à une publication dans un journal dans les mois qui viennent.

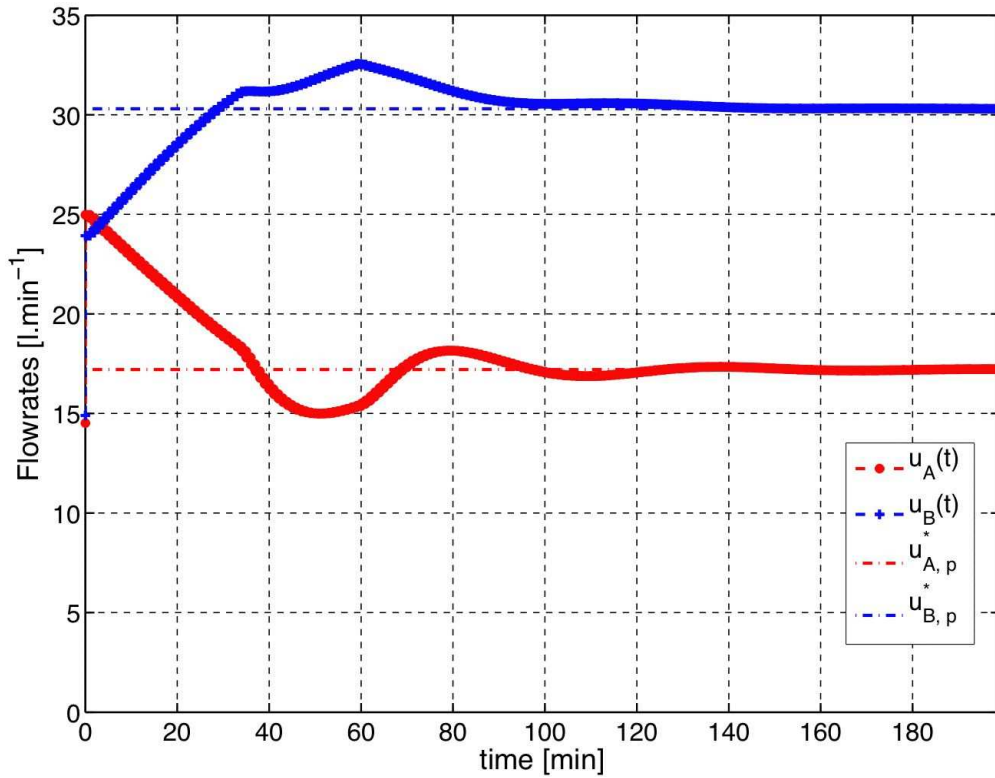


FIGURE 3.8 – Evolution des entrées appliquées au procédé avec RTO-MA, sur la base des mesures transitoires,  $\tau_{RTO} = 1$  min et des gradients estimés par MU.

### 3.6 Conditions suffisantes de faisabilité et d’optimalité

En résumé, les travaux réalisés durant les cinq dernières années ont permis de répondre à plusieurs limitations de RTO-MA. Il est à présent possible de garantir que l’on utilise un modèle adéquat, sans avoir à connaître la solution du problème à l’avance. RTO-MA peut aussi être appliqué lorsque le modèle et le procédé ne disposent pas des mêmes entrées manipulables. Une méthode a été développée pour utiliser RTO-MA durant le transitoire qui permet d’éviter de multiplier les itérations de régime permanent à régime permanent. Une nouvelle méthode d’estimation des gradients du procédé a été développée et des solutions ont été proposées pour estimer les gradients en régime stationnaire, pendant le transitoire.

Cependant, la qualité principale de RTO-MA, à savoir sa capacité à converger à la solution du problème du vrai procédé, est une propriété à *convergence*. Dans [96], des conditions nécessaires de convergence ont été établies. Elles ne

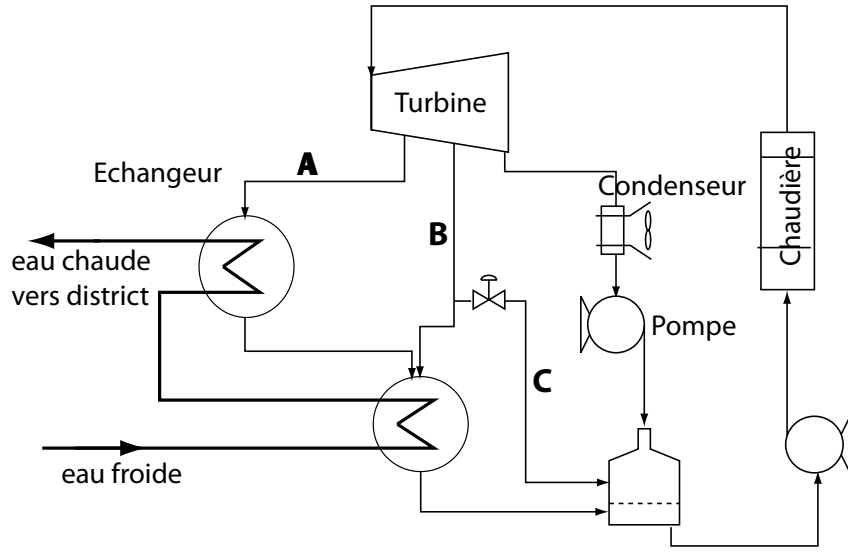


FIGURE 3.9 – Le cycle vapeur de l’usine de Tridel de 80MW.

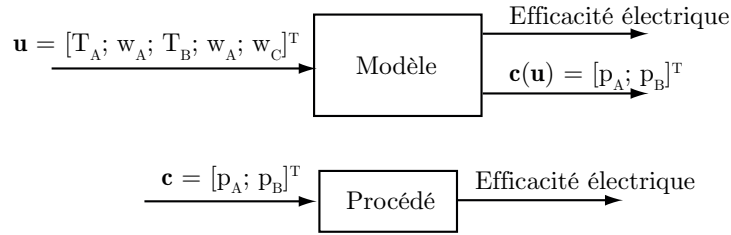


FIGURE 3.10 – Degrés de liberté du modèle vs. degrés de liberté l’usine de Tridel de 80MW.

sont malheureusement pas suffisantes, et restent d’un intérêt pratique limité. La question est donc : “est-il possible de garantir la convergence?” avec un jeu de conditions et d’hypothèses réalistes et peu limitantes. De plus, les méthodes de RTO sont des méthodes d’optimisation pour lesquelles la force motrice réside dans les mesures disponibles sur le procédé : chaque itération  $k$  est donc une réalisation du procédé. Il est donc souhaitable, si l’on opte pour une approche itérative que les performances s’améliorent d’itération en itération, et surtout que chaque réalisation soit faisable. En effet si chaque itération est un réalisation expérimentale et si les méthodes de RTO comme RTO-MA sont capables de converger vers le bon ensemble de contraintes actives, dans la pratique on désire que cette convergence se déroule *du bon côté des contraintes, pour le procédé*.

Garantir que chaque itération de RTO-MA, ou plus généralement d’une méthode de RTO quelconque, sera (i) faisable, i.e.  $\mathbf{G}_p(\mathbf{u}_k^*) \leq \mathbf{0}$ ,  $\forall k$  et que (ii) la fonction coût décroît entre deux itérations successives  $\phi_p(\mathbf{u}_k^*) < \phi_p(\mathbf{u}_{k-1}^*)$ ,  $\forall k >$

1 se heurte à une difficulté conceptuelle majeure. En effet,  $\mathbf{u}_k^*$  s'obtient par la résolution d'un problème d'optimisation : on ne dispose donc pas d'une loi d'adaptation des entrées qui permettent de déduire des propriétés particulières pour  $\mathbf{u}_k^*$ ,  $\mathbf{G}_p(\mathbf{u}_k^*)$  et  $\phi_p(\mathbf{u}_k^*)$ , connaissant  $\mathbf{u}_{k-1}^*$ ,  $\mathbf{G}_p(\mathbf{u}_{k-1}^*)$  et  $\phi_p(\mathbf{u}_{k-1}^*)$ . A contrario, les méthodes de RTO implicites disposent généralement d'un tel lien analytique, puisqu'elles implantent en pratique une loi de commande "auro-optimisante" connue. Pour cette raison, j'avais pu, durant ma thèse, démontrer que la méthode d'optimisation dynamique implicite basée sur les mesures (de type run-to-run) que j'avais développée, convergeait globalement pour une classe de systèmes nonlinéaires [68, 69, 71]. Cependant, cette démonstration n'est possible qu'au prix d'hypothèses sur la nature de la solution optimale. Plus particulièrement, la méthode n'était pas particulièrement adaptée aux cas où l'ensemble des contraintes actives à l'optimum change avec l'incertitude. C'est une des raisons pour lesquelles nous avons essayé d'établir une approche plus générale, sous couvert d'hypothèses moins fortes, qui permette de pouvoir démontrer la convergence par chemin faisable

### 3.6.1 Principe

Dans [96], il avait été proposé de filtrer les modificateurs entre chaque itération pour éviter de modifier de façon trop abrupte le problème d'optimisation entre les itérations successives. En fait la matrice de gains du filtre (cf. équation 2.19), consiste en un certain nombre de degrés de liberté supplémentaires permettant l'établissement de conditions nécessaires de convergence. Cependant, non seulement ces conditions ne sont pas des conditions suffisantes, mais elles sont de plus difficiles à vérifier dans la pratique, et elles ne permettent ni de garantir que la convergence se fera de façon monotone ni que chaque itération sera faisable.

C'est pour combler ces lacunes que nous avons travaillé à l'établissement de conditions suffisantes de convergence monotone et faisable (SCFO). Pour cela, nous avons d'abord réalisé qu'il était plus aisé de filtrer directement les entrées à appliquer au procédé plutôt que les modificateurs des problèmes d'optimisation servant à les déterminer. De plus, il a fallu travailler à un degré d'abstraction supérieur, en suivant l'adage (classique en mathématiques) qui stipule qu'il est parfois plus facile de démontrer un résultat dans le cas général que dans un cas particulier.

Ainsi, plutôt que de postuler le choix d'une méthode spécifique de RTO, on considère qu'un algorithme quelconque de RTO est utilisé. Celui-ci est traité comme un mapping inconnu, noté  $\Gamma(\cdot)$ , entre (i) les entrées appliquées au procédé aux itérations précédentes  $\mathbf{u}_0, \dots, \mathbf{u}_k$  et les sorties mesurées correspondantes  $\mathbf{y}_0, \dots, \mathbf{y}_k$  et (ii) l'entrée optimale à l'itération  $k + 1$ , notée  $\mathbf{u}_{k+1}^*$ .

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{k+1}^* &= \Gamma(\mathbf{u}_0, \dots, \mathbf{u}_k, \mathbf{y}_0, \dots, \mathbf{y}_k) \\ \mathbf{u}_{k+1} &= \mathbf{u}_k + K(\mathbf{u}_{k+1}^* - \mathbf{u}_k) \end{aligned} \tag{3.56}$$

L'équation  $\mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{u}_k + K(\mathbf{u}_{k+1}^* - \mathbf{u}_k)$  est le filtre appliqué aux entrées dont  $K$  est le gain.  $K$  est donc le degré de liberté à régler pour forcer la convergence du côté faisable des contraintes.

Cette approche s'explique plus aisément dans le cas où seule la faisabilité à chaque itération est considérée. Supposons que l'on connaisse les constantes de Lipschitz de chacune des contraintes *du procédé*. C'est une hypothèse fréquente notamment pour l'analyse des propriétés de convergence des algorithmes d'optimisation ou de stabilité des lois de commande. Considérons de plus, par souci de simplicité et sans perte de généralité, que chaque contrainte est Lipschitzienne dans chacune des directions de l'entrée. On dispose ainsi d'une information *globale* qui indique que pour toute contrainte  $g_{p,j}$  et selon chacune des coordonnées  $i$  de  $\mathbf{u}$  :

$$|g_{p,j}(u_{i,1}) - g_{p,j}(u_{i,2})| < \kappa_{i,j} |u_{i,1} - u_{i,2}|, \quad \forall \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2 \in \mathcal{I}, \quad i = 1, \dots, n \quad (3.57)$$

avec  $\kappa_{i,j}$  qui sont les constantes de Lipschitz associées à la contrainte  $g_{p,j}$ , pour la  $i^{\text{ème}}$  coordonnée de  $\mathbf{u}$ . Puisque les constantes de Lipschitz sont globales, elles caractérisent les variations maximales de chacune des contraintes entre deux points quelconques, et donc entre  $\mathbf{u}_k$  (les entrées appliquées au procédé à l'itération précédente) et  $\mathbf{u}_{k+1}^*$ , les entrées optimales proposées par l'algorithme RTO pour la prochaine itération. Connaissant  $\mathbf{G}_p(\mathbf{u}_k)$  on est en mesure de borner  $\mathbf{G}_p(\mathbf{u}_{k+1}^*)$ . S'il est clair que  $\mathbf{G}_p(\mathbf{u}_{k+1}^*) < \mathbf{0}$ , alors  $\mathbf{u}_{k+1}^*$  peut être directement appliqué au procédé, car les constantes de Lipschitz étant globales, la borne induite sur  $\mathbf{G}_p(\mathbf{u}_{k+1}^*)$  est nécessairement conservatrice. Dans le cas contraire il convient de déterminer une valeur de  $K$  pour calculer  $\mathbf{u}_{k+1}$  d'après 3.56 de telle sorte qu'en bornant l'accroissement de  $\mathbf{G}_p$  entre  $\mathbf{u}_k$  et  $\mathbf{u}_{k+1}$ , on puisse garantir que  $\mathbf{G}_p(\mathbf{u}_{k+1}) < \mathbf{0}$ .

Par exemple, dans le cas monodimensionnel on peut ainsi borner l'accroissement de  $g_p$  entre deux points consécutifs  $u_k$  et  $u_{k+1}$  :

$$g_p(u_{k+1}) < g_p(u_k) + \kappa |u_{k+1} - u_k| \quad (3.58)$$

Il devient ainsi possible de garantir que  $g_p(u_{k+1}) < 0$  si :

$$\kappa |u_{k+1} - u_k| < -g_p(u_k) \quad (3.59)$$

$$|K(\mathbf{u}_{k+1}^* - \mathbf{u}_k)| < -g_p(u_k) \quad (3.60)$$

$$K < \frac{-g_p(u_k)}{|\mathbf{u}_{k+1}^* - \mathbf{u}_k|} \quad (3.61)$$

Il est donc possible d'établir une condition suffisante sur la valeur du gain du filtre  $K$  qui assure que la contrainte  $g_p$  sera satisfaite. Dans le cas multivariable (plusieurs entrées, plusieurs contraintes) l'analyse est identique, à ceci près qu'il faut considérer toutes les contraintes et toutes les directions  $\mathbf{u}_i$ , et donc, de choisir  $K$  égal au minimum des gains associés à chacune des contraintes. La limite de cette approche, robuste et donc conservatrice, est que l'algorithme va stopper dès qu'une contrainte mesurée est active, i.e.  $g_p(u_k) = 0 \rightarrow K = 0$  et  $\mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{u}_k$ . Il peut donc y avoir une convergence prématurée en un point faisable mais potentiellement sous-optimal. Dans [29] nous avons identifié et analysé ce problème de convergence prématurée qui est assez bien connu dans

la littérature de l'optimisation numérique, mais peu observé pour l'optimisation expérimentale des procédés.

Par contre, dès que l'information sur les gradients du procédé est utilisée, il est possible de construire connaissant  $\mathbf{u}_{k+1}^*$ , une valeur de  $\mathbf{u}_{k+1}$  qui garantisse la décroissance stricte du coût et la satisfaction des contraintes (i.e.  $\phi_p(\mathbf{u}_{k+1}) < \phi_p(\mathbf{u}_k)$  et  $\mathbf{G}_p(\mathbf{u}_{k+1}) < \mathbf{0}$ ), bien sûr au prix d'un certain nombre d'hypothèses. La présentation détaillée de l'approche dépasse le contexte de ce document. Ne sont présentées que les hypothèses nécessaires sur le procédé ainsi que le principe général de la méthode et un algorithme basique permettant son implantation. Ces résultats sont résumés dans deux documents distribués en archives ouvertes et font l'objet d'un article de journal à soumis pour publication dans "SIAM Journal on Optimization" [22, 23, 24].

## Hypothèses

Puisque nous ne pouvons nous appuyer sur des propriétés particulières du modèle ou de l'algorithme de RTO, il est clair que les hypothèses doivent être réalisées sur le comportement du *procédé*. Nous formulons donc les hypothèses suivantes :

**A1** : Les fonctions  $\phi_p$  et  $\mathbf{G}_p$  sont deux fois continues et dérivables sur l'espace des entrées  $\mathcal{I} := \{\mathbf{u} : \mathbf{u}^L \preceq \mathbf{u} \preceq \mathbf{u}^U\}$ .

**A2** : Le point initial,  $\mathbf{u}_0$ , est strictement faisable ( $\mathbf{G}_p(\mathbf{u}_0) \prec \mathbf{0}$ ).

**A3** : Les contraintes du problème d'optimisation du procédé sont qualifiées (i.e. les contraintes actives sont linéairement indépendantes).

**A4** : Quel que soit l'algorithme de RTO choisi, celui-ci génère systématiquement une entrée dans  $\mathcal{I}$ , i.e.  $\mathbf{u}_{k+1}^* \in \mathcal{I}$ .

A1 est peu restrictive, et est nécessaire pour supposer l'existence des gradients et des matrices Hessiennes des fonctions coût et contraintes pour le procédé. A2 est nécessaire car la preuve de faisabilité à chaque itération est obtenue par un raisonnement par récurrence. Elle n'est pas restrictive puisque l'on imagine mal, dans la pratique, que l'on tenterait d'appliquer un algorithme d'optimisation à un procédé sans avoir au préalable réussi à le stabiliser à un point faisable. L'hypothèse A3 est une hypothèse classique en optimisation numérique. Dans le cas d'un problème basé sur le modèle nous serions aussi obligé de faire cette hypothèse pour que les conditions de KKT soient des conditions nécessaires d'optimalité. L'hypothèse A4 n'est pas nécessaire au sens strict, mais a été formulée pour simplifier les démonstrations.

Pour établir de façon théorique les conditions suffisantes de faisabilité et d'optimalité nous avons de plus besoin de :

- La disponibilité des gradients de  $\phi_p$  et de  $\mathbf{G}_p$  à l'itération  $k$ .
- La connaissance des constantes de Lipschitz de  $\mathbf{G}_p$ .
- La connaissance d'une borne quadratique supérieure sur  $\phi_p$ .
- La mesure exacte de  $\mathbf{G}_p$  à l'itération  $k$  (i.e. mesures non bruitées, ou estimations parfaites de  $\mathbf{G}_p$ ).

Ces quatre points ne sont nécessaires que pour fournir la base théorique de l'analyse. Nous avons aussi proposé des modifications de la méthode pour les cas où tout ou partie de cet ensemble d'informations était indisponible.

### Algorithme de base

Pour éviter le problème de convergence prématurée et en même temps garantir la décroissance de  $\phi_p$  entre deux itérations successives, l'idée a été de combiner l'information globale (constantes de Lipschitz, borne quadratique sur la fonction coût) et l'information locale, c'est à dire les gradients du procédé. Plutôt que de rester bloqué à la première contrainte activée, utiliser les gradients, notamment des contraintes, doit permettre de longer la contrainte proche de l'activité tout en forçant la fonction coût à décroître. Ainsi on se sert des gradients du coût et des contraintes pour projeter  $\mathbf{u}_{k+1}^*$  dans l'intersection du demi-espace de descente de la fonction coût et du demi-espace de descente des contraintes proches de l'activité à l'itération précédente. La direction de Newton étant toujours localement une direction de descente pour les fonctions continues, cette projection est a priori réalisable en tout point qui ne serait pas déjà l'optimum. L'analyse correspondant à cette approche en deux temps "projection, filtrage" nécessitant pas moins de quatre lemmes et cinq théorèmes [22, 23, 24], ne sont présentés ci-après que l'algorithme principal permettant une implémentation basique de la méthode.

Nous proposons tout d'abord de réaliser la projection suivante de  $\mathbf{u}_{k+1}^*$  en  $\bar{\mathbf{u}}_{k+1}^*$  :

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{u}}_{k+1}^* = \arg \underset{\mathbf{u}}{\text{minimize}} \quad & \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_{k+1}^*\|_2^2 \\ \text{subject to} \quad & \nabla g_{p,j}(\mathbf{u}_k)^T (\mathbf{u} - \mathbf{u}_k) \leq -\delta_{g,j} \\ & \forall j : g_{p,j}(\mathbf{u}_k) \geq -\epsilon_j \\ & \nabla \phi_p(\mathbf{u}_k)^T (\mathbf{u} - \mathbf{u}_k) \leq -\delta_\phi \\ & \mathbf{u}^L \preceq \mathbf{u} \preceq \mathbf{u}^U \end{aligned} \quad (3.62)$$

suivie de l'application de (3.56) avec  $\bar{\mathbf{u}}_{k+1}^*$  en lieu et place de  $\mathbf{u}_{k+1}^*$ , avec un gain de filtre tel que :

$$\begin{aligned} K_k := \min \left\{ \min_{j=1, \dots, n_g} \left[ \frac{-g_{p,j}(\mathbf{u}_k)}{\sum_{i=1}^{n_u} \kappa_{ji} |\bar{u}_{k+1,i}^* - u_{k,i}|} \right], \right. \\ \left. -2 \frac{\nabla \phi_p(\mathbf{u}_k)^T (\bar{\mathbf{u}}_{k+1}^* - \mathbf{u}_k)}{(\bar{\mathbf{u}}_{k+1}^* - \mathbf{u}_k)^T \mathbf{Q}_\phi (\bar{\mathbf{u}}_{k+1}^* - \mathbf{u}_k)} \right\} \\ K_k > 1 \rightarrow K_k := 1 \end{aligned} \quad (3.63)$$

Schématiquement, la projection garantit que  $\bar{\mathbf{u}}_{k+1}^*$  est le point le plus proche de  $\mathbf{u}_{k+1}^*$  se trouvant dans un demi-espace, défini au voisinage de  $\mathbf{u}_k$ , pour lequel

il est garanti que la fonction coût va décroître d'au moins  $\delta_\phi$ . Simultanément,  $\bar{\mathbf{u}}_{k+1}^*$  se trouve dans un demi-espace, défini au voisinage de  $\mathbf{u}_k$  pour lequel toute les contraintes  $g_{p,j}$ , telles que  $\forall j : g_{p,j}(\mathbf{u}_k) \geq -\epsilon_j$ , i.e. les plus proches de  $\mathbf{0}$ , sont (localement) assurées de décroître d'au moins  $\delta_{g,j}$ . Etant proches de  $\mathbf{0}$ , les forcer à décroître est le meilleur moyen d'éviter tout risque qu'elles ne deviennent positives, et donc que les contraintes soient violées. Enfin le filtre garantit que les entrées qui vont réellement appliquées au procédé sont calculées de telle sorte que *toutes* les contraintes seront satisfaites et qu'il est *globalement* garanti que la fonction coût du procédé va diminuer.

Le schéma de base est donc un schéma en 2 étapes : projeter et filtrer. L'avantage est que tous les algorithmes de RTO disponibles, des plus basiques aux plus complexes peuvent être utilisés pour générer  $\mathbf{u}_{k+1}^*$ . Les plus performants, notamment les algorithmes pour lesquels un modèle est utilisé – comme RTO-MA – permettront une convergence plus rapide.

### 3.6.2 Exemple illustratif d'application des SCFO

Considérons l'exemple numérique suivant, avec deux contraintes convexes et un contrainte concave, toutes les trois incertaines, i.e. on ne connaît pas leur représentation analytique :

$$\begin{aligned} \underset{u_1, u_2}{\text{minimize}} \quad & \phi_p(\mathbf{u}) = (u_1 - 0.5)^2 + (u_2 - 0.4)^2 \\ \text{subject to} \quad & g_{p,1}(\mathbf{u}) = -6u_1^2 - 3.5u_1 + u_2 - 0.6 \leq 0 \\ & g_{p,2}(\mathbf{u}) = 2u_1^2 + 0.5u_1 + u_2 - 0.75 \leq 0, \\ & g_{p,3}(\mathbf{u}) = -u_1^2 - (u_2 - 0.15)^2 + 0.01 \leq 0 \\ & u_1 \in [-0.5, 0.5], u_2 \in [0, 0.8] \end{aligned} \quad (3.64)$$

#### Algorithme 1 – Two-Step

Le modèle suivant est disponible, qui dépend d'un vecteur de paramètres incertains  $\boldsymbol{\theta}$  :

$$\phi(\mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) = \theta_1(u_1 - 0.3)^2 + \theta_2(u_2 - 0.3)^2 \quad (3.65)$$

$$g_1(\mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) = -\theta_3 u_1^2 - 3.5u_1 + u_2^2 - 0.6 \leq 0 \quad (3.66)$$

$$g_2(\mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) = \theta_4 u_1 + u_2 + \theta_5 \leq 0 \quad (3.67)$$

$$g_3(\mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) = -u_1^2 - (u_2 - 0.15)^2 + 0.01 \leq 0 \quad (3.68)$$

Notons que la troisième contrainte est supposée ici parfaitement modélisée.

Les paramètres du modèle sont réestimés à chaque itération et le modèle adapté est optimisé pour déterminer  $\mathbf{u}_{k+1}^*$ . C'est un exemple représentatif de l'application de la méthode two-step RTO qui devrait échouer, puisque le modèle est structurellement différent du procédé.



## Algorithme 2 – Random-Step

Pour montrer l’efficacité des SCFO, considérons le cas extrême pour lequel  $\mathbf{u}_{k+1}^*$  est déterminé par l’utilisation d’un générateur uniforme de nombres aléatoires, tel que  $u_{k+1,1}^* \sim \mathcal{U}[-0.5, 0.5]$ ,  $u_{k+1,2}^* \sim \mathcal{U}[0, 0.8]$ . C’est bien sûr un exemple complètement artificiel, mais qui illustre bien la pertinence des SCFO puisque  $\mathbf{u}_{k+1}^*$  est pratiquement tiré au hasard.

Les figures 3.11-3.12 illustrent les résultats pour les algorithmes 1 et 2, respectivement. On remarque que :

- La faisabilité est assurée pour tous les cas.
- La convergence prématurée est observée si uniquement les conditions de faisabilité de [29] sont implantées. Il est possible de longer la ou les contraintes ou l’algorithme pourrait rester bloquer si l’on applique les conditions de faisabilité des SCFO.
- Planter les SCFO dans leur intégralité conduit à une convergence faisable dans tous les cas. D’autres algorithmes ont été testés (descente de gradient, RTO-MA) avec les mêmes observations qui ne sont pas présentés dans ce mémoire par souci de concision.
- Les SCFO évitent systématiquement le point KKT instable de  $\mathbf{u} = [-0.09, 0.11]$ .
- Le choix de l’algorithme affecte le nombre d’itérations. Ainsi, l’algorithme 2, erratique par nature, nécessite entre 15 (a3) et 100% (b3) d’itérations supplémentaires pour converger.
- La convergence est bien monotone dans le cas où l’ensemble des SCFO est implanté.

Plusieurs variations de l’algorithme basique proposé ci-dessus ont été aussi proposées, notamment pour les cas où :

- *la mesure des contraintes est bruitée.* Dans un tel cas, il est possible que la borne sur le gain soit surestimée par rapport à la réalité, ce qui augmente le risque de perdre la garantie de faisabilité. En conséquence une approche robuste, avec 4 différentes façon de réaliser un “back-off” sur les contraintes, a été proposée qui permet de garantir la préservation de la faisabilité.
- *les gradients ne sont pas parfaitement mesurés ou estimés.* Dans ce cas aussi, des bornes robustes sur les valeurs du gradient doivent être utilisées, en utilisant par exemple la méthode de régularisation de [27], qui permet d’obtenir des bornes sur le gradient.
- *les constantes de Lipschitz et la borne quadratique supérieure sont méconnues.* Plusieurs méthodes ont été proposées, notamment lorsque l’on dispose d’un modèle du procédé pour déterminer une estimation robuste de ces quantités.
- *La vitesse de convergence est importante, i.e. il est impossible de réaliser un grand nombre d’itérations.* Dans ce cas, l’impact de l’utilisation du modèle et de la relaxation de certaines contraintes a été étudié. Il a été illustré que toute information certaine sur le procédé, structurelle (ex. : on sait qu’une contrainte est concave même si on ne connaît pas son expres-

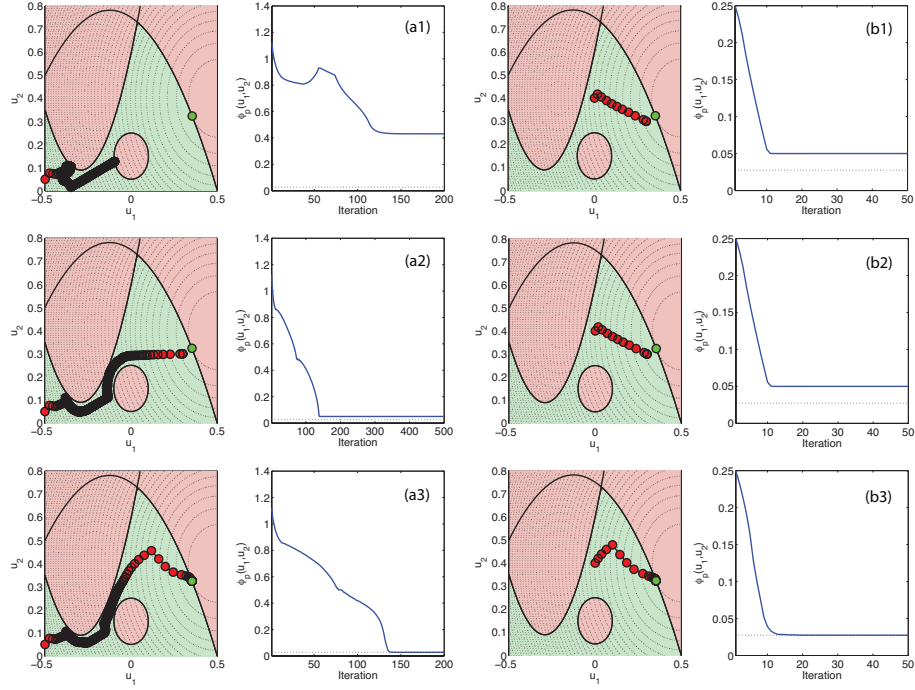


FIGURE 3.11 – Performances de l’Algorithme 1 (two step) avec (1) les conditions de faisabilité de [29] sont implantées – la convergence prématurée est donc possible, (2) la condition de faisabilité des SCFO est implantée, (3) toutes les SCFO sont implantées, pour deux points initiaux (a) et (b). Les contours de la fonction coût sont représentés par les cercles noirs pointillés, les contraintes *du procédé* sont tracées en noir, le domaine de faisabilité se distingue par l’utilisation de la couleur verte et le coût optimal pour le procédé est représenté en pointillés noirs sur les figures de droite. Le point vert figure la solution optimale du procédé.

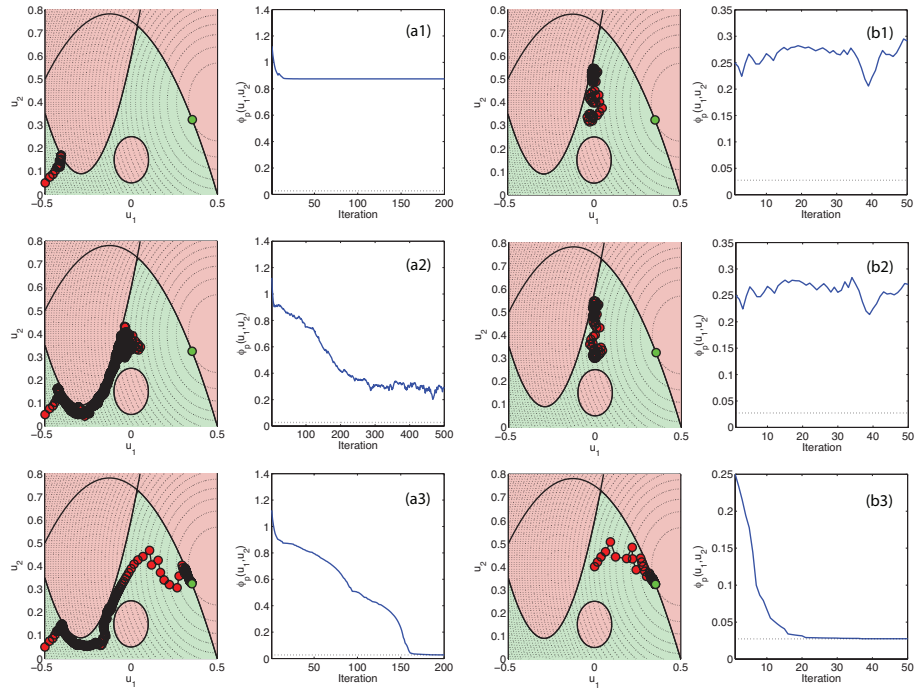


FIGURE 3.12 – Performances de l'Algorithme 2 (random step).

sion), fonctionnelle (on connaît une ou plusieurs contraintes totalement), partielle ou complète, diminue drastiquement le nombre d'itérations requises. De la même façon, si rendre les SCFO plus robustes en ajoutant un back-off sur les contraintes pour compenser l'erreur de mesure est très conservateur et peut conduire à une augmentation significative du nombre d'itérations, relaxer même faiblement une contrainte pour laquelle une satisfaction stricte n'est pas nécessaire peut avoir un impact considérable sur le nombre d'itérations.

### 3.6.3 Le solver “SCFO”

En parallèle de ses activités de recherche, Gene Bunin a développé un solver SCFO qui implante les résultats théoriques et méthodologiques susmentionnés. Adapté aux problèmes dont le nombre de grandeurs manipulables n'est pas trop élevé (i.e. jusqu'à une centaine), ce solver permet d'appliquer le post-traitement (projection - filtrage) discuté ci-dessus à, virtuellement, tous les algorithmes de RTO. Typiquement, les problèmes d'optimisation statique ou en régime permanent, les problèmes d'optimisation dynamique de type run-to-run (avec des profils d'entrée paramétrés) mais aussi les problèmes d'optimisation numérique pour lesquels l'évaluation de la fonction coût et des contraintes est computationnellement intensif, peuvent être résolus avec des garanties théoriques de faisabilité et d'optimalité. Le solver permet aussi l'incorporation des diverses approches pour rendre l'application de la méthode robuste en présence de bruit de mesure et/ou d'incertitude sur les gradients, ainsi que les techniques d'amélioration des performances en fonction de la connaissance disponible du système. Le solver a été proposé en téléchargement libre (<http://infoscience.epfl.ch/record/186672/files/>) dans une version Matlab et Octave. Il a été aussi soumis à une sélection de chercheurs internationaux, pour qu'ils puissent le tester, l'évaluer, éventuellement l'appliquer, et surtout – nous l'espérons – nous communiquer leur feedback sur son utilisation, ses limites et sur les possibilités d'amélioration. Au moment où j'écris ces lignes, il semble avoir été téléchargé plus de 10'000 fois, et Gene vient de distribuer une nouvelle version. Parallèlement, son utilisation a été testée en simulation comme sur des systèmes réels, pour le réglage itératif de contrôleurs (PID, MIMO, MPC, ...). Par exemple ont été ainsi réglés itérativement, un régulateur MPC pour le contrôle en température de cristalliseurs expérimentaux (dans le cadre d'une collaboration informelle avec l'Université de Tufts), et un régulateur d'ordre fixe pour un système torsionnel expérimental pour le suivi d'une trajectoire de référence périodique [28, 21]. Le solver a aussi été utilisé dans le cadre d'un projet de Master dans l'industrie chimique, pour l'amélioration itérative de la commande en température de réacteurs industriels batch.

## 3.7 Optimisation des procédés discontinus, répétés et/ou périodiques

### 3.7.1 RTO-MA pour les procédés discontinus

Dans le cadre de ma thèse [62], j'ai développé une méthodologie d'optimisation basée sur les mesures adaptée aux procédés batchs. Plus précisément, il s'agissait d'une méthode qui, sur la base de la construction du *modèle de la solution*, i.e. la nature, la séquence et la paramétrisation parsimonieuse du profil d'entrée nominal d'un problème d'optimisation dynamique, proposait d'utiliser les mesures des contraintes et des sensibilités mesurées à la fin de l'opération discontinue pour corriger la valeur nominale des paramètres du profil d'entrée. C'est une méthode d'adaptation directe des entrées, pour lesquelles l'objectif est de forcer itérativement la satisfaction de la partie terminale des conditions nécessaires d'optimalité pour le procédé batch réel. Des résultats méthodologiques proposant une méthode de détermination, de découplage et d'adaptation de combinaisons linéaires de paramètres du profil d'entrée ont été proposés [70]. La convergence globale de l'algorithme a été prouvée pour une classe de systèmes nonlinéaires [68, 69, 71] et la méthode a été appliquée avec succès à un réacteur de copolymérisation en émulsion inverse industriel d'une tonne [73]. L'approche était et reste intéressante. Cependant elle est intrinsèquement limitée, à l'image de la plupart des méthodes d'optimisation basées sur une reformulation en un problème de contrôle, par la nécessité d'une connaissance a priori de l'ensemble des contraintes actives à l'optimum pour le procédé réel. Dans le cas du procédé industriel de [73], ce n'était pas restrictif puisque l'analyse du procédé montre de façon indiscutable que pour le problème d'optimisation (minimisation du temps de batch sous contraintes de température, masse molaire et conversion) et le *modèle de la solution* considérés (i.e. un profil de température semi-adiabatique), la contrainte terminale la plus restrictive ne peut être qu'active. Dans le cas général il n'est bien sûr pas toujours possible de tirer des conclusions aussi définitives.

Pour ne pas avoir à s'appuyer sur une connaissance a priori de la solution (même purement descriptive), l'utilisation des méthodes d'adaptation directe des entrées s'avère dans beaucoup de cas insuffisante. D'où l'idée exploitée dans le cadre la thèse de Sean Costello (TD2), d'étudier la faisabilité et la pertinence de l'extension des concepts et des méthodes de RTO-MA à l'optimisation dynamique des procédés discontinus. On espère ainsi bénéficier de la capacité de RTO-MA à converger à un optimum du procédé réel sans connaissance a priori de la solution.

Comme première étape il a été proposé de se placer dans le formalisme discret et deux schémas ont été proposés pour réaliser cette extension [40].

Considérons donc le système dynamique discret suivant :

$$\mathbf{x}_p[j+1] = \mathbf{F}_p(\mathbf{x}_p[j], \mathbf{u}[j], j) \quad (3.69)$$

$$\mathbf{x}_p[0] = \mathbf{x}_0, \quad (3.70)$$

avec  $\mathbf{u}[j]$  le vecteur de paramètres qui détermine les entrées  $\mathbf{u}(t)$  entre les instants d'échantillonnage  $t_j$  et  $t_{j+1}$ .  $\mathbf{F}_p$  dénote les équations dynamiques discrètes du procédé.

Le problème d'optimisation basé sur le modèle s'écrit :

$$\begin{aligned} \mathbf{U}^* = & \arg \min_{\mathbf{U}} \phi(\mathbf{x}[f]) \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{x}[j+1] = \mathbf{F}(\mathbf{x}[j], \mathbf{u}[j], j), \quad \mathbf{x}[0] = \mathbf{x}_0, \\ & \mathbf{G}(\mathbf{X}, \mathbf{U}) \leq \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (3.71)$$

avec  $f$  l'instant d'échantillonnage terminal, et la matrice  $\mathbf{U}$  et  $\mathbf{X}$  qui représentent les matrices des entrées et des états entre les instants d'échantillonnage 0 et  $f-1$  inclus. Sean Costello a proposé deux méthodes de modification du problème d'optimisation 3.71, entre les batchs successifs. La première méthode (méthode A) consiste à modifier le coût et les contraintes, tandis que la deuxième (méthode B) propose de modifier directement l'équation dynamique discrète du problème basé sur le modèle.

### Méthode A

Soient  $\mathbf{U}_k^*$  and  $\mathbf{X}_k^*$  les trajectoires optimales pour le  $k^{eme}$  problème d'optimisation basé sur le modèle.  $\mathbf{U}_k^*$  est appliqué au procédé réel ce qui conduit aux trajectoires d'état  $\mathbf{X}_{p,k}$ . Le problème d'optimisation pour le  $(k+1)^{eme}$  batch s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_{k+1}^* = & \arg \min_{\mathbf{U}} \phi(\mathbf{x}[f]) + \lambda_k^\phi (\mathbf{U} - \mathbf{U}_k^*) \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{x}[j+1] = \mathbf{F}(\mathbf{x}[j], \mathbf{u}[j], j), \quad \mathbf{x}[0] = \mathbf{x}_0, \\ & \mathbf{G}(\mathbf{X}, \mathbf{U}) + \epsilon_k + \lambda_k^G (\mathbf{U} - \mathbf{U}_k^*) \leq \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (3.72)$$

avec les modificateurs :

$$\epsilon_k = \mathbf{G}(\mathbf{X}_{p,k}, \mathbf{U}_k^*) - \mathbf{G}(\mathbf{X}_k^*, \mathbf{U}_k^*). \quad (3.73)$$

$$\lambda_k^\phi = \frac{d\phi(\mathbf{X}_{p,k}[f])}{d\mathbf{U}} - \frac{d\phi(\mathbf{X}_k^*[f])}{d\mathbf{U}}. \quad (3.74)$$

$$\lambda_k^G = \frac{d\mathbf{G}(\mathbf{X}_{p,k}, \mathbf{U}_k^*)}{d\mathbf{U}} - \frac{d\mathbf{G}(\mathbf{X}_k^*, \mathbf{U}_k^*)}{d\mathbf{U}}. \quad (3.75)$$

L'opérateur de dérivation  $\frac{d(\cdot)}{d\mathbf{U}}$  représente la dérivée par rapport à  $\mathbf{U}$  qui tient compte du fait que  $\mathbf{X}$ , et seulement  $\mathbf{X}$ , est déterminé par  $\mathbf{U}$ . Une définition rigoureuse est donné dans l'appendice 1 de [40].

### Méthode B

La méthode B propose d'ajouter des modificateurs sur l'équation dynamique,  $\mathbf{F}$ . Dans ce cas, à l'issue du  $k^{eme}$  batch, le problème d'optimisation pour le  $k+1^{eme}$  batch s'écrit :

$$\begin{aligned}
\mathbf{U}_{k+1}^* &= \arg \min_{\mathbf{U}} \phi(\mathbf{x}[f]) \\
\text{s.t.} \quad \mathbf{x}[j+1] &= \mathbf{F}(\mathbf{x}[j], \mathbf{u}[j], j) + \mathbf{c}_k[j] + \mathbf{C}_k[j] \begin{bmatrix} \mathbf{x} - \mathbf{x}_{p,k}[j] \\ \mathbf{u} - \mathbf{u}_k^*[j] \end{bmatrix} \\
\mathbf{G}(\mathbf{X}, \mathbf{U}) &\leq \mathbf{0},
\end{aligned} \tag{3.76}$$

avec les modificateurs :

$$\mathbf{c}_k[j] = \mathbf{x}_{p,k}[j+1] - \mathbf{F}(\mathbf{x}_{p,k}[j], \mathbf{u}_k^*[j], j). \tag{3.77}$$

$$\mathbf{C}_k[j] = [\mathbf{A}_{p,k}[j] - \mathbf{A}_k[j], \mathbf{B}_{p,k}[j] - \mathbf{B}_k[j]], \tag{3.78}$$

et  $\mathbf{A}_{p,k}[j]$  et  $\mathbf{B}_{p,k}[j]$  qui représentent les dérivées partielles du système d'équations discrètes pour le procédé :

$$\mathbf{A}_{p,k}[j] = \frac{\partial \mathbf{F}_p(\mathbf{x}_{p,k}[j], \mathbf{u}_k^*[j], j)}{\partial \mathbf{x}[j]}, \quad j = 1, \dots, f. \tag{3.79}$$

$$\mathbf{B}_{p,k}[j] = \frac{\partial \mathbf{F}_p(\mathbf{x}_{p,k}[j], \mathbf{u}_k^*[j], j)}{\partial \mathbf{u}[j]}, \quad j = 0, \dots, f-1, \tag{3.80}$$

et  $\mathbf{A}_k[j]$  and  $\mathbf{B}_k[j]$  qui représentent les dérivées partielles du système d'équations discrètes pour le modèle  $\mathbf{F}$  évaluées en  $\mathbf{x}_{p,k}[j]$  and  $\mathbf{u}_k^*[j]$ . L'effet des modificateurs d'ordre 0, i.e.  $\mathbf{c}_k[j]$ , est intéressant à interpréter. Pour toute paire  $\mathbf{x}_{p,k}[j]$  et  $\mathbf{u}_k^*[j]$  pour le  $k^{eme}$  batch,  $\mathbf{c}_k[j]$  est la différence entre ce que le modèle aurait prédit pour les états en  $t_{j+1}$  et les états réels  $\mathbf{x}_{p,k}[j+1]$ . Ainsi  $\mathbf{c}_k[j]$  peut être interprété comme une correction de la prédiction à un pas et garantit que les équations dynamiques pour le  $k+1^{eme}$  batch n'ont pas d'erreur de prédiction pour la trajectoire d'entrée  $\mathbf{U}_k^*$ , c'est à dire :

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_{p,k}, \mathbf{u}_k, j) + \mathbf{c}_k[j] = \mathbf{F}_p(\mathbf{x}_{p,k}, \mathbf{u}_k, j) \quad \forall j. \tag{3.81}$$

Les figures 3.13 - 3.14 représentent schématiquement les méthodes A et B, pour le cas où seules les modifications d'ordre 0 sont implantées.

### Propriétés

Dans [40] il est démontré que si ces deux méthodes convergent, elles convergent à une trajectoire d'entrée faisable pour le procédé si les modificateurs d'ordre 0 sont utilisés. De plus, si les modificateurs d'ordre 1 sont implantés, la convergence, si elle a lieu, est nécessairement en une trajectoire d'entrée qui satisfait les conditions d'optimalité de premier ordre pour le procédé. A noter que nous avons considéré que l'incertitude n'était présente que dans les équations dynamiques, et qu'ainsi les expressions des contraintes et la fonction coût sont connues. C'est

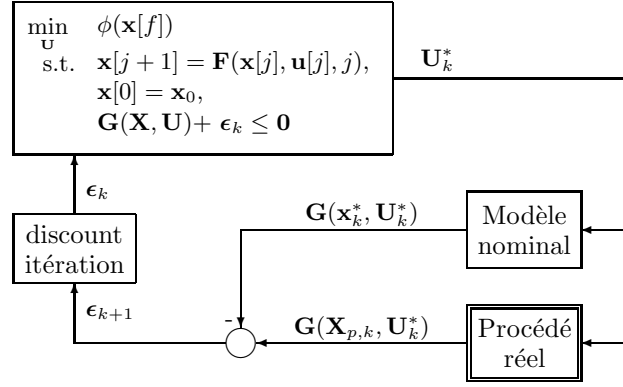


FIGURE 3.13 – Méthode A d'ordre 0, modifications des contraintes.

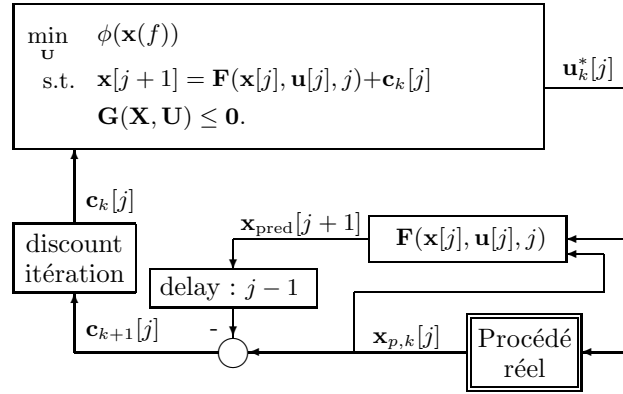


FIGURE 3.14 – Méthode B d'ordre 0, modification de l'équation dynamique.



une hypothèse simplificatrice peu limitante puisque, dans la plupart des cas, il est possible, par un choix adéquat de variables d'état, de transférer vers  $\mathbf{F}$  toute l'incertitude présente dans les contraintes et la fonction coût.

Pour l'implantation des modificateurs d'ordre 1, la question de la disponibilité des gradients se pose. Une approche par différences finies – pour laquelle on réaliserait plusieurs batchs consécutifs avec des entrées légèrement différentes – est envisageable. Cependant, pour la méthode A, au moins  $f + n_u + 1$  batchs seraient nécessaires, tandis que  $n_x + n_u + 1$  serait le minimum pour la méthode B. Ainsi, la méthode A voit le nombre minimal de réalisations expérimentales augmenter linéairement avec le nombre de périodes d'échantillonnage  $f$ , ce qui donne un avantage à la méthode B, pour autant que le nombre d'états ne soit pas trop élevé.

### Exemple illustratif

Les méthodes A et B sont testées pour l'optimisation d'un réacteur semi-batch isotherme ([114]). Deux réactions concurrentes ont lieu :  $A + B \rightarrow C$  and  $2B \rightarrow D$  et l'objectif est de maximiser la production de  $C$  au temps final, en manipulant pour cela le débit d'alimentation en  $B$ . On adjoint au label de la méthode (A ou B) le nombre 0 ou 1 selon que la méthode considère les modificateurs d'ordre 0 ou d'ordres 0 et 1, respectivement

Un bilan de matière permet de déterminer le modèle en temps continu :

$$\begin{bmatrix} \dot{c}_A \\ \dot{c}_B \\ \dot{V} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -k_1 c_A c_B \\ -k_1 c_A c_B - 2k_2 c_B^E \\ 0 \end{bmatrix} + \frac{1}{V} \begin{bmatrix} -c_A \\ c_{B_{in}} - c_B \\ V \end{bmatrix} u. \quad (3.82)$$

Les concentrations de  $C$  et de  $D$  se déduisent aisément :

$$c_C = \frac{1}{V} (c_{A0} V_0 - c_A V). \quad (3.83)$$

$$c_D = \frac{1}{2V} ((c_A + c_{B_{in}} - c_B)V - (c_{A0} + c_{B_{in}} - c_{B0})). \quad (3.84)$$

Le tableau 3.5 résume les paramètres du modèle. On considère un profil d'entrée constant par morceaux, avec  $T_s = 15.625$  entre chaque instant de commutation.  $T_s$  étant égal à la période d'échantillonnage, le modèle discret se déduit du modèle (3.82) :

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(\mathbf{x}[j], u[j]) &= T_s \begin{bmatrix} -\bar{k}_1 x_1[j] x_2[j] \\ -\bar{k}_1 x_1[j] x_2[j] - 2\bar{k}_2 x_2[j]^E \\ 0 \end{bmatrix} \\ &+ \frac{T_s}{x_3[j]} \begin{bmatrix} -x_1[j] \\ c_{B_{in}} - x_2[j] \\ x_3[j] \end{bmatrix} u[j] + \begin{bmatrix} x_1[j] \\ x_2[j] \\ x_3[j] \end{bmatrix}, \quad (3.85) \\ \mathbf{x}[0] &= \mathbf{x}_0 \end{aligned}$$

avec  $\bar{k}_1$ ,  $\bar{k}_2$  et  $\bar{E}$  les valeurs nominales des paramètres incertains. Le problème d'optimisation non modifié s'écrit :

$$\begin{aligned}
\mathbf{U}_{k+1}^* &= \arg \max_{\mathbf{U}} x_3[f] c_C[f] \\
\text{s.t.} \quad & \mathbf{x}[j+1] = \mathbf{F}(\mathbf{x}[j], \mathbf{u}[j], j), \quad \mathbf{x}[0] = \mathbf{x}_0, \\
\text{équations} \quad & (3.83) - (3.84) \\
& u_{min} \leq u[j] \leq u_{max} \\
& c_B[f] \leq c_{Bf,max} \\
& c_D[f] \leq c_{Df,max}
\end{aligned} \tag{3.86}$$

et l'incertitude est considérée comme intégralement contenue dans le modèle dynamique  $\mathbf{F}$ .

TABLE 3.5 – Paramètres, fenêtres opératoires et conditions initiales.

$k_1$	0.053	l/mol min	$k_1$	0.03	l/mol min
$k_2$	0.128	l/mol min	$\bar{k}_2$	0.15	l/mol min
$E$	2		$\bar{E}$	2.5	
$c_{Bin}$	5	mol/l	$u_{min}$	0	l/min
$u_{max}$	0.001	l/min	$c_{Bf,max}$	0.025	mol/l
$c_{Df,max}$	0.15	mol/l	$c_{A0}$	0.72	mol/l
$c_{B0}$	0.05	mol/l	$V_0$	1	l
$T_s$	15.625	minutes	$f$	16	

La figure 3.15 représente les profils d'alimentation en  $B$  optimaux pour le modèle nominal (connu) et pour le procédé réel (inconnu). La figure 3.16 illustre la convergence des méthodes A-0, A-1 B-0 et B-1. Pour la méthode B-0 deux batchs présentent un coût supérieur au coût optimal ce qui est causé par la violation d'une des contraintes (figure 3.17). Cependant les quatre méthodes convergent à une valeur de coût optimale ou proche de l'optimum (B-1). De la même façon, toutes les contraintes convergent dans le domaine de faisabilité (figure 3.17). Pour éviter ces violations de contraintes, il conviendrait d'appliquer le post-traitement des SCFO entre chaque adaptation, ou plus simplement d'ajouter un biais négatif à chacune des contraintes. Néanmoins cet exemple illustre l'efficacité de la méthode et son applicabilité à l'optimisation dynamique run-to-run des procédés discontinus batchs et/ou semi-batchs sans connaissance a priori de l'ensemble des contraintes actives.

### 3.7.2 RTO pour les procédés discontinus en boucle fermée

L'application de RTO-MA aux problèmes d'optimisation dynamique run-to-run est rendue plus complexe par la présence d'une loi de commande pendant le run. Ainsi, si la trajectoire optimale prédite par le modèle consiste à suivre une rampe de température, le contrôleur va effectivement, dans le cas idéal réaliser

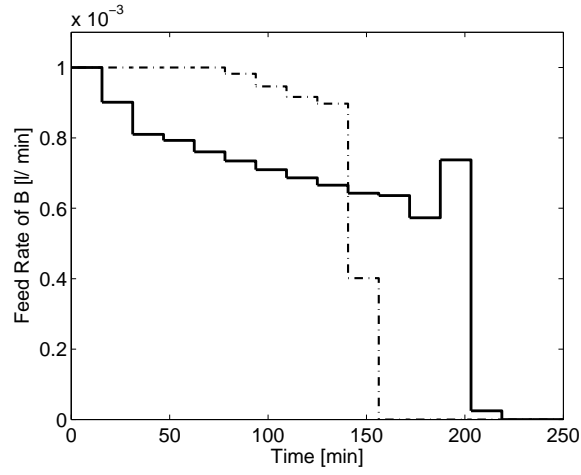


FIGURE 3.15 – Profils d'entrée optimaux pour le modèle et pour le procédé réel en pointillés et en trait plein, respectivement.

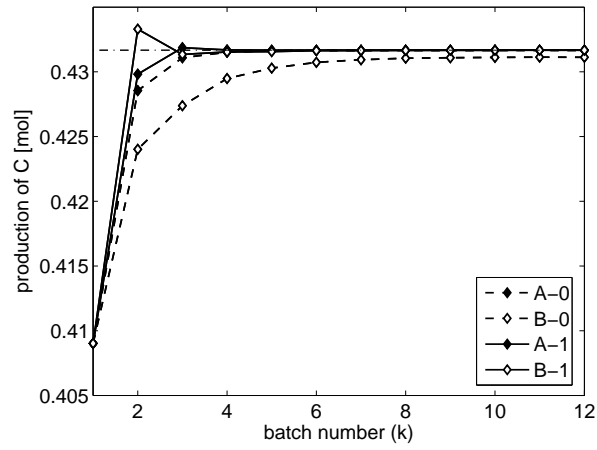


FIGURE 3.16 – Fonction coût vs. numéro de batch. La ligne horizontale en trait mixte indique la valeur optimale pour le procédé réel.

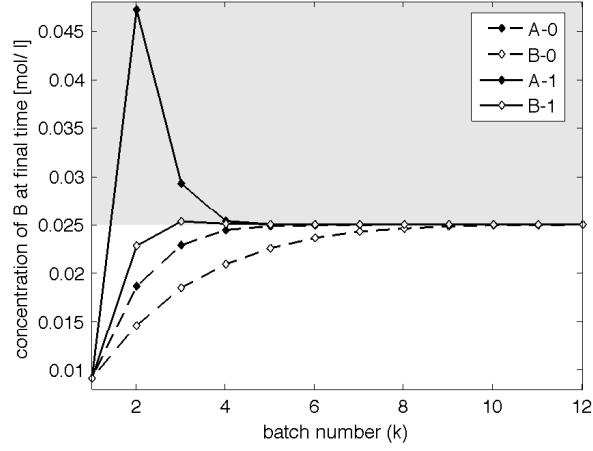


FIGURE 3.17 – Concentration de  $B$  au temps final vs. numéro de batch. La zone grisée est infaisable.

cette trajectoire. Ainsi, à la fin du “run” la mesure seule d’une contrainte ou d’une grandeur de sortie peut ne pas être suffisante. En effet, si le modèle prédit qu’une contrainte doit être active à l’optimum et le contrôleur fait en sorte qu’elle le soit, il n’y apparemment pas de différences entre le comportement prédit et le comportement mesuré. Or, c’est justement ce type d’informations qui représente la “force motrice” des algorithmes de RTO. Par contre, il est clair que si le contrôleur réussit à réaliser le suivi de la trajectoire optimale prédite par le modèle, il va typiquement pour cela devoir calculer des trajectoires de commande qui seront différentes de celles prédites par le modèle.

Dans le cadre de sa thèse, Sean Costello (TD2) a proposé une méthode originale pour reformuler le problème de telle sorte qu’il puisse être résolu par une méthode de RTO [41]. Sans rentrer dans le détail, la contribution s’appuie sur la constatation que la solution du problème d’optimisation dynamique basé sur le modèle est une trajectoire qui dépend des paramètres du modèle :  $\mathbf{z}^*(\boldsymbol{\theta})$ . Le principe est de corriger cette trajectoire de run en run (de cycle en cycle dans [41], où l’exemple d’application est un voile de kite utilisée pour tracter un bateau). Le suivi de cette trajectoire est assuré par un contrôleur (par ex. MPC), ce qui conduit en fin de run (resp. de cycle) à une performance mesurée. Si cette trajectoire nominale est paramétrée avec un nombre fini de paramètres scalaires  $\boldsymbol{\alpha}$ , manipuler ces paramètres permet de modifier la trajectoire suivie de run en run, et par conséquent de modifier la valeur de la performance mesurée. L’originalité de l’approche de [41], c’est qu’avec cette formulation, représentée graphiquement par la figure 3.18, les contraintes de chemin et terminales disparaissent complètement du problème d’optimisation périodique, puisque les contraintes sont intégrées à la trajectoire et gérées par le contrôleur. La deuxième origina-

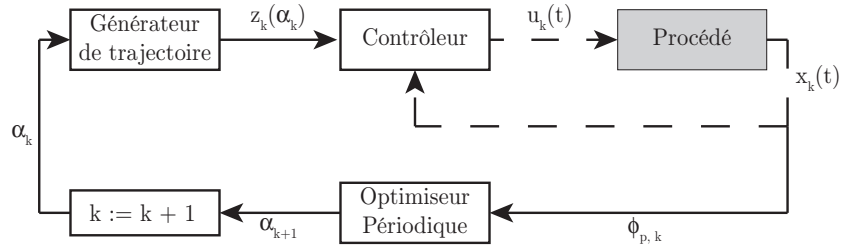


FIGURE 3.18 – RTO run-to-run et génération de trajectoire optimale à suivre pour un procédé discontinu répété.

lité tient à la méthode proposée pour corriger la trajectoire à suivre. Considérons pour simplifier que la trajectoire optimale est à l'intérieur strict de l'ensemble de trajectoires réalisables (i.e. aucune contrainte de chemin n'est active). Si  $\mathbf{z}^*(\boldsymbol{\theta})$  est la trajectoire nominale qui dépend des paramètres du modèle, Sean Costello a proposé d'implanter comme trajectoire à suivre durant le run  $k$  :

$$\mathbf{z}_k(\boldsymbol{\alpha}_k) := \mathbf{z}^*(\boldsymbol{\theta}_0) + \left. \frac{\partial \mathbf{z}^*}{\partial \boldsymbol{\theta}} \right|_{\boldsymbol{\theta}_0} \boldsymbol{\alpha}_k \quad (3.87)$$

En d'autre termes de corriger la trajectoire nominale  $\mathbf{z}^*(\boldsymbol{\theta}_0)$  dans les directions  $\frac{\partial \mathbf{z}^*}{\partial \boldsymbol{\theta}}$ , i.e. les plus sensibles à l'incertitude paramétrique calculées pour les paramètres nominaux  $\boldsymbol{\theta}_0$ , avec un pas  $\boldsymbol{\alpha}_k$  déterminé par une méthode de RTO adéquate – dans le cas de [41], une simple descente de gradient. Par souci de concision je n'ai présenté que le cas où la trajectoire est non contrainte, mais la méthode tient en compte les contraintes de chemin potentiellement actives. Ces résultats préliminaires seront formalisés et développés d'ici la fin du doctorat de Sean (TD2).

## Chapitre 4

# Axes de Recherche et Contributions Appliquées

Le chapitre précédent a essentiellement résumé des contributions méthodologiques. La motivation principale était de lever un certain nombre de verrous scientifiques pour faciliter l'application des méthodes de RTO dans l'industrie. Dans ce chapitre, on s'intéresse à des travaux appliqués selon trois axes principaux : (i) la modélisation, la commande et l'optimisation des réacteurs chimiques, (ii) la modélisation, la commande et l'optimisation des systèmes énergétiques et (iii) la modélisation, la commande et l'optimisation appliqués à la bioingénierie. Les deux premiers champs d'application sont ceux qui présentent un potentiel évident pour l'application de RTO. La chimie industrielle est historiquement le champ d'application principal, tandis que les besoins de méthodes du Process Systems Engineering (PSE) – parmi lesquelles le RTO – pour le design et l'opération des systèmes énergétiques connaît un vif intérêt, justifié par la crise énergétique, la sortie du nucléaire (en Suisse et en Allemagne) ou encore par le réchauffement climatique. La bioingénierie, ici illustrée par l'exemple de travaux sur le traitement du diabète (avec Roche) est un domaine d'application pour l'instant plus marginal, mais à grand potentiel. Dans le cas du traitement du diabète, des résultats ont été obtenus aux niveaux de la modélisation et de la commande. À l'inverse les systèmes chimiques et énergétiques ont permis l'application simulée, expérimentale ou industrielle des méthodes de RTO, notamment celles développées par l'auteur et ses co-auteurs.

### 4.1 Optimisation dynamique de réacteurs industriels de copolymérisation

Durant ma thèse, j'ai eu l'opportunité d'appliquer mes résultats méthodologiques à un réacteur de copolymérisation industriel. La raison pour laquelle les résultats principaux en sont résumés ci-après est pour souligner que même si cette appli-

cation a été réussie, l'applicabilité de la méthode développée à des problèmes industriels réels nécessitait la validité d'une hypothèse sur la nature de la solution optimale que nos travaux plus récents sur l'optimisation en temps réel a rendue inutile dans une large mesure.

#### 4.1.1 Description du procédé

La copolymérisation en émulsion inverse d'acrylamide est considérée. La nucléation et la polymérisation sont confinées dans les gouttelettes de monomère, avec chaque particule qui est supposée se comporter comme un petit réacteur de polymérisation indépendant. La polymérisation suit un mécanisme classique de type "free-radical" avec, en plus du transfert de matière entre les phases, des réactions de terminaison monomol éculaire avec les espèces aux interfaces. Plus de détails sont disponibles dans [87, 86].

A l'échelle industrielle, d'autres réactions doivent être considérées comme l'ajout d'agent de transfert de chaîne ou de réticulant, afin d'obtenir la distribution et le type de ramification souhaités. De plus, la présence d'impuretés inhibe la polymérisation de façon peu reproductible d'un batch à l'autre. Ainsi les efficacités d'initiation varient de manière significative durant et entre les batches. Tout ceci complique fortement un travail de modélisation déjà difficile. C'est pourquoi un modèle de tendance, basé sur la terminologie standard des moments de la distribution de masse molaire, a été développé et les paramètres ajustés en fonction de la réalité industrielle.

#### 4.1.2 Optimisation dynamique nominale

Un *modèle de tendances* a été développé [71], qui néglige la dynamique de décomposition de l'initiateur, dont la concentration est supposée constante par morceaux (suite aux injections successives d'initiateur durant la réaction). Sont décrites : (i) la consommation du monomère, (ii) les masses molaires moyennes en masse et en nombre, (iii) l'effet inhibiteur de l'oxygène résiduel (au moyen d'une dynamique de premier ordre pour l'efficacité de l'initiation), (iv) l'effet de l'agent de transfert de chaînes (CTA) et (v) les dynamiques de la température du réacteur  $T$  et du manteau .

Le procédé étant discontinu et répété, l'idée était de l'optimiser de run en run. Le modèle étant très simplifié, l'application des méthodes d'optimisation basée sur les mesures s'impose d'elle-même, pour rejeter l'effet de l'incertitude. Avant notre collaboration, nos partenaires industriels opéraient leurs réacteurs de façon isotherme avec à l'esprit que :

1. *Le dégagement de chaleur acceptable est limité* : La réaction est très exothermique. En mode isotherme, la température du manteau approche fréquemment sa borne inférieure. De plus hautes valeurs de  $T$  peuvent conduire à l'emballement du réacteur.
2. *La masse molaire finale est contrainte* : La température de consigne est choisie pour atteindre la spécification de masse molaire. De plus hautes

températures favoriseraient la conversion au détriment de la masse molaire.

Le problème d'optimisation à temps minimal suivant est formulé :

$$\min_{T(t), t_f} t_f \quad (4.1)$$

$$\text{s.t.} \quad \dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{F}(\mathbf{x}(t), T(t)), \quad x(0) = x_o \quad (4.2)$$

$$X(t_f) \geq X_c \quad (4.3)$$

$$\bar{M}_w(t_f) \geq \bar{M}_{w,c} \quad (4.4)$$

$$T_{j,in}(t) \geq T_{j,in,min} \quad (4.5)$$

$$T(t) \leq T_{max}, \quad (4.6)$$

avec  $t_f$  le temps final à minimiser,  $T(t)$  le profil de température,  $\mathbf{x}(t)$  le vecteur d'état,  $\mathbf{F}$  les équations du modèle de tendances, et  $\mathbf{x}_o$  les conditions initiales,  $X_c$  la borne inférieure sur la conversion finale  $X(t_f)$ ,  $\bar{M}_{w,c}$  la borne inférieure sur la masse molaire moyenne en masse finale  $\bar{M}_w(t_f)$ ,  $T_{j,in,min}$  la borne inférieure de la température d'alimentation du fluide de refroidissement  $T_{j,in}(t)$  qui circule dans le manteau, et  $T_{max}$ , la borne supérieure sur la température du réacteur  $T(t)$ .

### 4.1.3 Résultats

Le profil de température nominal est calculé numériquement sur la base du modèle de tendances et approché par le profil semi-adiabatique suivant [73] :

1. *Arc isotherme* : La première partie du profil est approchée par un arc isotherme fixé à la valeur de la température de production isotherme classique. Cet arc assure que : (i) la contrainte de limitation de chaleur est satisfaite et (ii) le copolymère produit durant la première partie de la réaction a la bonne masse molaire,
2. *Arc Adiabatique* : La deuxième partie du profil traduit le compromis entre augmenter la température et donc favoriser la conversion (et ainsi réduire le temps de batch) et défavoriser la masse molaire. On coupe la circulation de fluide de refroidissement et la chaleur générée par la réaction sert à augmenter  $T$  exponentiellement.

En conséquence, le profil de température peut être paramétré avec deux paramètres (i) le temps de commutation entre les deux arcs,  $t_{sw}$ , et (ii) le temps final  $t_f$ . À noter que ce profil semi-adiabatique a été confirmé analytiquement (résultats non publiés) et par optimisation globale stochastique dans le cadre d'une collaboration avec l'Université de Porto [?].

Ayant observé que : (i) la contrainte sur la masse molaire est moins restrictive que celle sur la température, (ii) le temps final est défini par l'atteinte de la conversion de consigne, et (iii) la solution nominale indique que la contrainte terminale sur la température est active à l'optimum, nous avons reformulé le problème d'optimisation dynamique comme un problème de contrôle run-to-run pour lequel  $t_{sw}$  est manipulé itérativement pour satisfaire  $T(t_f) = T_{max}$ .



En effet si l'on se place dans un contexte run-to-run, la température finale atteinte par le réacteur, même si elle résulte de l'intégration d'un flux dynamique, ne dépend que de la quantité de réactifs qui reste dans le réacteur  $t_{sw}$ , et donc c'est une fonction de  $t = t_{sw}$ . Le contrôle run-to-run illustré par la figure 4.1 permet donc bien de forcer  $T(t_f) = T_{max}$ , pour le procédé réel, en manipulant  $t_{sw}$ .

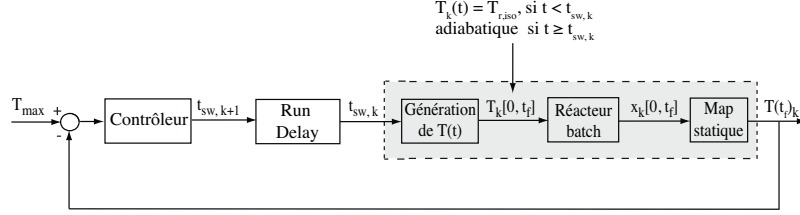


FIGURE 4.1 – Contrôle run-to-run pour l'optimisation dynamique d'un réacteur batch de polymérisation industrielle.

Si l'observation (ii) ne souffre pas d'ambiguïté (toute conversion supérieure à la conversion minimale est superflue et, de fait, est sous-optimale), (i) et (iii) sont des *hypothèses* sur la structure de la solution optimale. (i) a été confirmée par des essais sur un réacteur semi-industriel de 80l mais, a contrario (iii), i.e. l'hypothèse d'activité de la contrainte sur la température n'a pu être confirmée qu'en simulation. Malgré cela, l'approche run-to-run a été implantée avec succès et le temps final de réaction a pu être réduit de 20% en trois batchs, tous "in-spec" [73]. La Figure 4.2 illustre les profils de températures adaptés et les viscosités terminales (corrélées à la masse molaire) correspondantes.

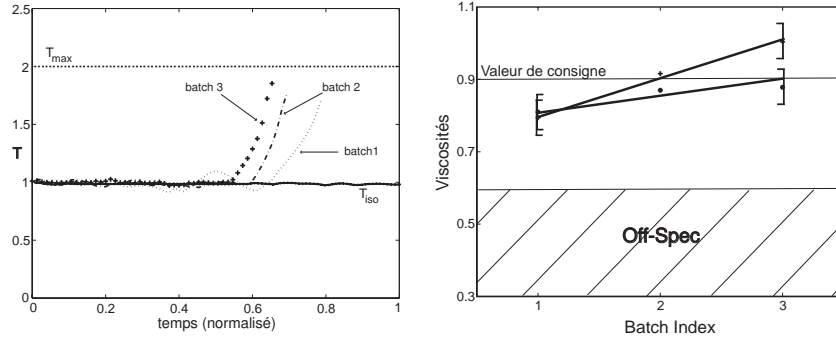


FIGURE 4.2 – Profils de températures semi-adiabatiques, adaptés en run-to-run, et viscosités terminales correspondantes.

#### 4.1.4 Limites de l’approche

Dans le cas du réacteur discuté ci-dessus, les années de production qui ont suivi l’étude ont confirmé a posteriori la validité de l’hypothèse sur la restrictivité supérieure de la contrainte sur la température (ainsi, tous les batchs semi-adiabatiques tels que  $T(t_f) \leq T_{max}$  ont été “in-spec”). Par contre, considérer que le *profil semi-adiabatique* est toujours la bonne structure de profil de température pour être optimal est une hypothèse forte. Cependant, il est clair qu’optimiser ce profil permet de déterminer le meilleur profil semi-adiabatique, et donc d’être optimal pour ce choix de paramétrisation. Depuis cette étude, tous les batchs réalisés en mode semi-adiabatique ont été : (i) moins longs que les batchs isothermes et (ii) in-spec. Reste que la dernière hypothèse, c’est à dire que  $T(t_f) = T_{max}$  à l’optimum est une hypothèse non vérifiable sur la nature de la solution optimale du procédé. Elle est par contre intuitivement valide pour *cette réaction et ce problème d’optimisation* : tout batch pour lequel  $T(t_f) \leq T_{max}$  est sous-optimal puisque cette contrainte est supposée moins restrictive que celle sur la masse molaire et qu’atteindre une température plus haute aurait réduit le temps de batch.

Il reste que cette contribution appliquée, même si c’est une réussite, illustre les limites de l’approche par reformulation, qui, comme elles nécessitent une consigne pour les grandeurs contrôlées (ici  $T_{max}$  pour  $T(t_f)$ ) rendent obligatoires des hypothèses sur la solution du problème d’optimisation dynamique. En pratique, ces hypothèses ne peuvent pas toujours être confirmées par l’intuition ou par l’analyse du système. D’où l’intérêt des méthodes de RTO explicites, comme RTO-MA, donc l’application permet de détecter l’ensemble des contraintes actives à l’optimum sans connaissance a priori.

## 4.2 Optimisation des Systèmes Énergétiques

### 4.2.1 Préambule

Les systèmes de production d’énergie sont d’excellents systèmes pour l’application des méthodes de type RTO [115]. Ils subissent des aléas forts et non prédictibles (variation de disponibilité d’une source renouvelable, variation de charge par l’utilisateur, variation des prix dans les marchés dérégulés). Ils sont en outre souvent difficiles à modéliser, et très intéressants à optimiser, dans un contexte de crise énergétique mondiale et d’incitation à l’utilisation de renouvelables [66].

Mes travaux de recherche sur l’optimisation des systèmes énergétiques concernent trois types de systèmes, principalement : (i) les piles à combustible, (ii) énergie et bâtiments et (iii) les cerfs-volants. J’ai classé mes travaux sur l’optimisation des piles à combustible dans la section systèmes énergétiques, car leur vocation est de produire de la puissance. Il aurait été possible de classer ces travaux dans la section traitant des contributions aux systèmes chimiques, car une pile à combustible n’est, in fine, rien d’autre qu’un réacteur électrochimique. L’approche

choisie pour les modéliser, commander et optimiser est du reste, très similaire à celle qui aurait été mise en œuvre pour n'importe quel réacteur chimique.

J'ai aussi été amené à travailler sur la digestion anaérobie, qui est un procédé de traitement des eaux par voie biologique, et, un système énergétique en ce qu'elle permet la synthèse de biogaz sous la forme de méthane et/ou d'hydrogène. Par souci de concision, ces travaux sont omis dans ce manuscrit.

#### 4.2.2 Modélisation, commande et optimisation de systèmes énergétiques (travaux réalisés à l'UPVD)

Dans cette brève section est juste fait mention de l'encadrement des travaux de recherche de Mr. Julien Eynard, tout d'abord pour son projet de Master à l'UPVD, puis durant les 13 premiers mois de sa thèse de doctorat, et de ceux de M. Benjamin Paris, doctorant à l'UPVD dont je n'avais pas officiellement la co-tutelle. Ces travaux concernant l'optimisation des systèmes énergétiques, ils s'inscrivent dans l'axe de recherche discuté dans cette section. Ils ne sont pas détaillés par souci de concision :

1. *Travail de Master de J. Eynard* : durant son travail de Master que j'ai initié et encadré en collaboration avec l'INRA de Narbonne – collaboration pour laquelle nous avons au préalable écrit une convention de recherche, Julien Eynard a travaillé sur la modélisation et le démarrage optimal de digesteurs anaérobie. Une simple extension du modèle simplifié AM2 a été développée pour étudier l'éventualité d'une inhibition par la biomasse. Les outils de la géométrie différentielle (algèbre et crochets de Lie) ont été utilisés pour déterminer l'écriture analytique de la solution de démarrage en temps minimal du modèle de digesteur.
2. *Energie et bâtiment* : dans le cadre de la thèse de Benjamin Paris, Julien Eynard, Benjamin et moi-même avons collaboré ensemble, avec la société Pyrescom (Perpignan), pour le développement d'un outil de monitoring et de commande optimale de la performance énergétique des bâtiments à énergies renouvelables de taille intermédiaire. Ce projet n'est pas détaillé en Annexe C, car je n'ai pas participé à son montage, mais uniquement à sa réalisation scientifique. Les outils utilisés sont ceux de la commande MPC et de l'intelligence artificielle, avec comme originalité méthodologique l'utilisation de MPC pour calculer le minimum d'apport fossile pour compléter un réglage de la température par énergies renouvelables, assuré par un contrôleur en boucle fermée classique [105, 104]
3. *Optim'ENR* : durant sa thèse que j'ai initié et co-encadré pendant 13 mois, Julien Eynard a travaillé à modéliser et optimiser la chaufferie collective de La Rochelle Cofely - GDF Suez, comportant une chaudière à bois, une chaudière gaz, une centrale de cogénération et des panneaux solaires, pour le chauffage de 2700 logements, et à favoriser l'utilisation des sources renouvelables. Plus de détails sont disponibles en Annexe C, mais les outils utilisés étant plus classiques (commande de type MPC), ce projet n'est pas détaillé ici.

### 4.2.3 Optimisation opératoire de piles à combustible à oxyde solide (SOFC)

RTO-MA a été appliqué dans un premier temps à une pile à combustible expérimentale de type SOFC. Comme la solution optimale est gouvernée par les contraintes, la formulation la plus simple, i.e. celle qui ne considère que les modificateurs d'ordre 0 a été utilisée. L'objectif est de maximiser le rendement électrique de la pile, en présence de variations de charge inconnues a priori. Si l'étude expérimentale de la pile permet d'affirmer que l'ensemble des contraintes actives change lorsque la charge varie de forte à faible (et vice-versa), l'utilisation de RTO-MA doit permettre de converger au bon ensemble de contraintes actives sans avoir à effectuer des hypothèses sur ce dernier.

#### Dispositif expérimental

L'étude a été réalisée sur un stack expérimental à oxyde solide (SOFC) développé au Laboratoire d'Energétique Industrielle (LENI) de l'EPFL pour HTceramix-SOFCpower [125, 50]. Le stack se compose de six cellules de 50 cm<sup>2</sup>. Les anodes sont fabriquées en nickel/yttrium-zircon stabilisé, et l'électrolyte est du YSZ dense. Les cathodes sont en (La, Sr)(Co, Fe)O<sub>3</sub>, ce qui permet d'envisager des fenêtres opératoires de température entre 650°C et 850°C. Les détails sont disponibles dans [125]. La figure 4.3 propose une photo de l'assemblage typique de ce type de stacks.

Le stack est placé dans un four à 775°C et connecté à une station de test qui délivre les débits d'alimentation en air et en combustible préchauffés (~770°C)

Une pile SOFC est un système alimenté en oxygène O<sub>2</sub> (air) et en hydrogène H<sub>2</sub> (fuel), qui réagissent électrochimiquement pour produire de la puissance électrique et de l'eau. L'assemblage en stacks s'explique par le besoin d'atteindre une gamme de tension préspecifiée et une pile SOFC à besoin d'une charge extérieure pour fonctionner.

Les débits d'hydrogène et d'oxygène ainsi que l'intensité du courant traversant la pile sont les entrées manipulables :

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \dot{n}_{H_2} \\ \dot{n}_{O_2} \\ I \end{bmatrix}. \quad (4.7)$$

#### Formulation du problème d'optimisation

On désire maximiser l'efficacité électrique de la pile, tout en satisfaisant un certain nombre de contraintes opératoires. Pour cela, on formule le problème

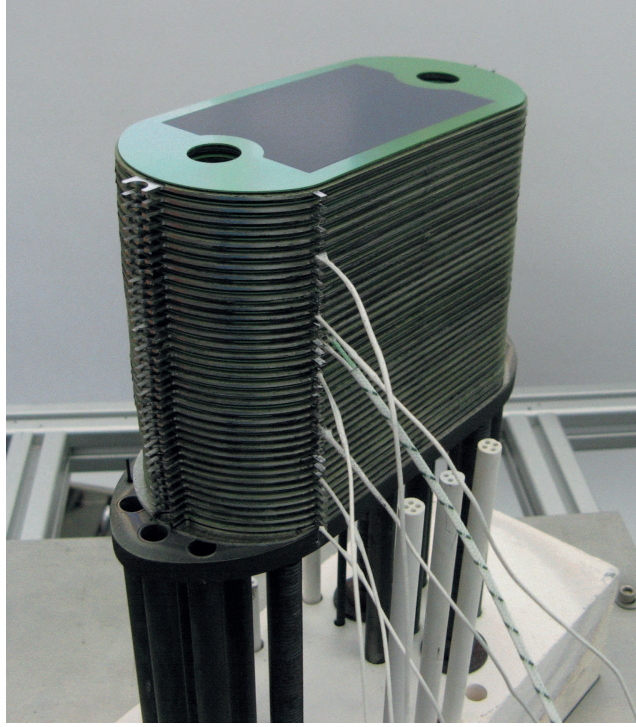


FIGURE 4.3 – Photographie d'un stack SOFC typique

d'optimisation suivant, basé sur le modèle :

$$\begin{aligned}
 \mathbf{u}^* &= \arg \max_{\mathbf{u}} \eta(\mathbf{u}, \theta) \\
 \text{s.t. } & p_{el}(\mathbf{u}, \theta) = p_{el}^S \\
 & U_{cell}(\mathbf{u}, \theta) \geq 0.75 \text{ V} \\
 & \nu(\mathbf{u}) \leq 0.75 \\
 & 4 \leq \lambda_{air}(\mathbf{u}) \leq 7 \\
 & u_1 \geq 3.14 \text{ ml}/(\text{min} \cdot \text{cm}^2) \\
 & u_3 \leq 30 \text{ A},
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

avec  $\eta$  qui représente l'efficacité électrique à maximiser,  $p_{el}^S$  la charge en puissance demandée par l'utilisateur (qui varie et dont on ne connaît pas *a priori* la valeur),  $U_{cell}$  la tension aux bornes des cellules (borné par valeurs inférieures car de faibles potentiels accélèrent la dégradation des cellules [125]),  $\nu$  l'utilisation du combustible (i.e. le pourcentage d'hydrogène qui réagit, borné par valeurs supérieures pour éviter, notamment, la réoxydation de l'anode et la privation locale d'hydrogène [125]),  $\lambda_{air} = 2 \frac{\dot{n}_{O_2}}{\dot{n}_{H_2}}$  le ratio d'excès d'oxygène par rapport à l'hydrogène (i.e. l'excès d'oxygène par rapport au besoin stoechiométrique d'oxygène).  $u_1 = \dot{n}_{H_2}$  et  $u_3 = I$  sont également bornés.

Finalement  $\theta$  est le vecteur de paramètres du modèle. Notons que ce vecteur n'intervient pas dans le calcul ni de  $\nu$  ni de  $\lambda_{air}$  qui sont uniquement des fonctions connues des variables d'entrée et sont donc connues avec certitude, i.e. pour un choix de  $\mathbf{u}$ , leurs valeurs réelles et prédites sont égales. Notons que ce modèle [26] est un modèle statique, qui incorpore de nombreuses hypothèses simplificatrices.

Nous avons montré qu'essentiellement, la solution du problème d'optimisation ci-dessus consistait à [26] :

- a) Maximiser  $\nu$  pour maximiser l'efficacité de la pile pour des basses charges en puissance, i.e.  $\nu = 0.75$  est *active* quand  $p_{el}^S$  est bas.
- b) Minimiser  $U_{cell}$  pour maximiser l'efficacité de la pile pour des hautes charges en puissance, i.e.  $U_{cell} = 0.75$  est *active* quand  $p_{el}^S$  est haut. Pour ces valeurs, forcer l'utilisation du fuel peut endommager le stack.

Cependant, à cause des erreurs de modélisation, structurelles et paramétriques, la solution nominale en fonction de  $p_{el}^S$  n'a quasiment aucune chance d'être optimale (et faisable) pour le stack réel. Cela ne pose pas de problèmes particuliers pour l'utilisation du fuel  $\nu$  et pour l'excès d'oxygène  $\lambda_{air}$ , car les deux grandeurs sont connues avec certitude. Par contre, pour le potentiel de cellule et par conséquent pour la puissance produite, l'incertitude de modélisation peut, si les entrées optimales du problème basé sur le modèle sont directement appliquées au stack, conduire à, par exemple une production insuffisante de puissance ou à un potentiel de cellule trop bas (dans le cas où le modèle surestime la production de puissance réelle du stack et le potentiel de cellule).

Le problème a été résolu en appliquant RTO-MA dans sa formulation la plus simple, i.e. celle pour laquelle seuls les modificateurs d'ordre 0 sont utilisés. Dans [96] il est montré que cette approche ("RTO via constraint adaptation") est suffisante pour converger à un point faisable pour le procédé réel. Cela conduit à la formulation du problème d'optimisation modifié suivant :

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}_k &= \arg \max_{\mathbf{u}} . \quad \eta(\mathbf{u}, \theta) \\
\text{s.t.} \quad & p_{el}(\mathbf{u}, \theta) + \varepsilon_{k-1}^{p_{el}} = p_{el}^S \\
& U_{cell}(\mathbf{u}, \theta) + \varepsilon_{k-1}^{U_{cell}} \geq 0.75 \text{ V} \\
& \nu(\mathbf{u}) \leq 0.75 \\
& 4 \leq \lambda_{air}(\mathbf{u}) \leq 7 \\
& u_1 \geq 3.14 \text{ ml}/(\text{min} \cdot \text{cm}^2) \\
& u_3 \leq 30 \text{ A.}
\end{aligned} \tag{4.9}$$

Comme discuté précédemment, on utilise un filtre passe-bas (exponentiel) pour filtrer la valeur des modificateurs d'ordre 0. Notons qu'il aurait aussi été possible de filtrer directement les entrées optimales calculées en résolvant le problème modifié. Ainsi, à l'itération  $k - 1$ , le problème d'optimisation (4.9) est résolu pour calculer  $\mathbf{u}_k$  avec les modificateurs  $\varepsilon_{k-1}^{p_{el}}$  et  $\varepsilon_{k-1}^{U_{cell}}$ . Une fois  $\mathbf{u}_k$  appliqué à la pile, les modificateurs sont adaptés comme suit :

$$\begin{aligned}
\varepsilon_k^{p_{el}} &= (1 - K_{p_{el}})\varepsilon_{k-1}^{p_{el}} + \\
&\quad K_{p_{el}}[p_{el,p,k}(\mathbf{u}_k) - p_{el}(\mathbf{u}_k, \theta)] \\
\varepsilon_k^{U_{cell}} &= (1 - K_{U_{cell}})\varepsilon_{k-1}^{U_{cell}} + \\
&\quad K_{U_{cell}}[U_{cell,p,k}(\mathbf{u}_k) - U_{cell}(\mathbf{u}_k, \theta)].
\end{aligned} \tag{4.10}$$

L'algorithme appliqué au stack expérimental est représenté schématiquement par la figure 4.4.

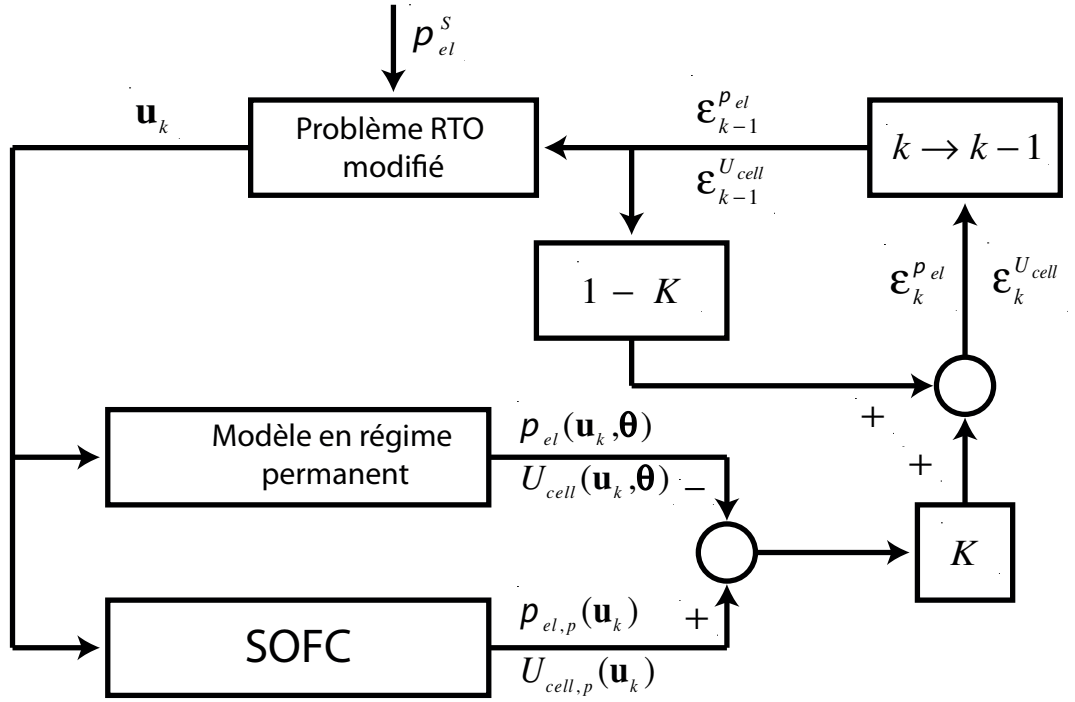


FIGURE 4.4 – Représentation schématique de l'algorithme RTO appliqué au stack SOFC expérimental

## Résultats

La figure 4.5 présente les résultats de l'application de "RTO via constraint adaptation", pour un scénario pour lequel la charge change toutes les 90 minutes. A noter que cette information n'est pas utilisée au niveau de l'implantation et agit comme une perturbation. Le problème d'optimisation est résolu ici toutes les 30 minutes. Cette fréquence correspond à la dynamique du four et est justifiée puisqu'elle correspond à l'atteinte du régime permanent. Conformément aux observations susmentionnées – qui ne sont pas supposées connues pour l'implantation – la contrainte sur l'utilisation du fuel est activée aux basses charges,

tandis que celle sur le potentiel de cellule devient active aux fortes charges. Les profils temporels de la puissance délivrée par la pile et de l'efficacité électrique, confirment que l'application de l'approche permet de maximiser cette dernière, tout en fournissant à convergence la puissance requise. C'est très clair durant les 90 premières minutes durant lesquelles on voit clairement  $\eta$  augmenter. La diminution de  $\eta$  entre la 90 et la 120<sup>ème</sup> minute est due à ce que la contrainte sur le potentiel de cellule est initialement violée avant d'être activée à convergence – RTO-MA ne garantissant l'obtention d'un point KKT et donc le respect des contraintes qu'à convergence.

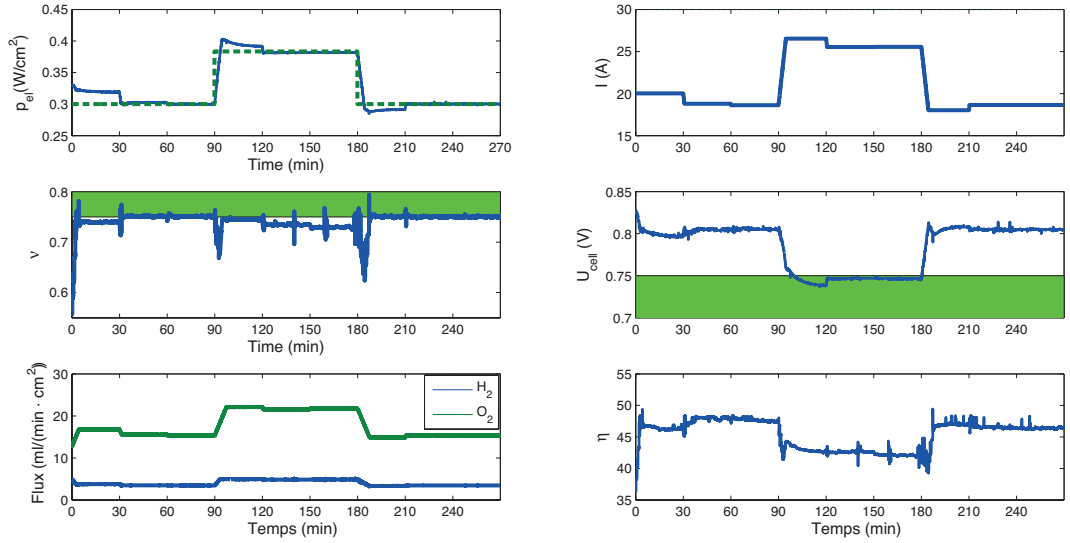


FIGURE 4.5 – RTO via constraint adaptation appliqué toutes les 30 minutes au stack expérimental.

La figure 4.6 présente les résultats de l'application de “RTO via constraint adaptation”, pour un scénario pour lequel la charge change toutes les 5 minutes de façon aléatoire. A noter encore que cette information n'est pas utilisée au niveau de l'implantation et agit comme une perturbation. Le problème d'optimisation est résolu ici toutes les 10 secondes. Cette valeur est fixée entre les échelles de temps électrochimiques et thermiques. Ainsi, l'hypothèse que le système est en régime stationnaire est fausse, mais la fréquence de ré-optimisation est suffisamment élevée pour que l'effet en soit rejeté au même titre que pour les autres sources d'incertitude.

Augmenter la fréquence de ré-optimisation permet de converger en moins d'itérations et donc, d'éviter les violations de contraintes observées précédemment et de réagir plus rapidement à une variation de charge. Pour le reste, les conclusions sont similaires : l'efficacité électrique est maximisée et les observations sur la nature des contraintes actives selon le niveau de charge sont confirmées.



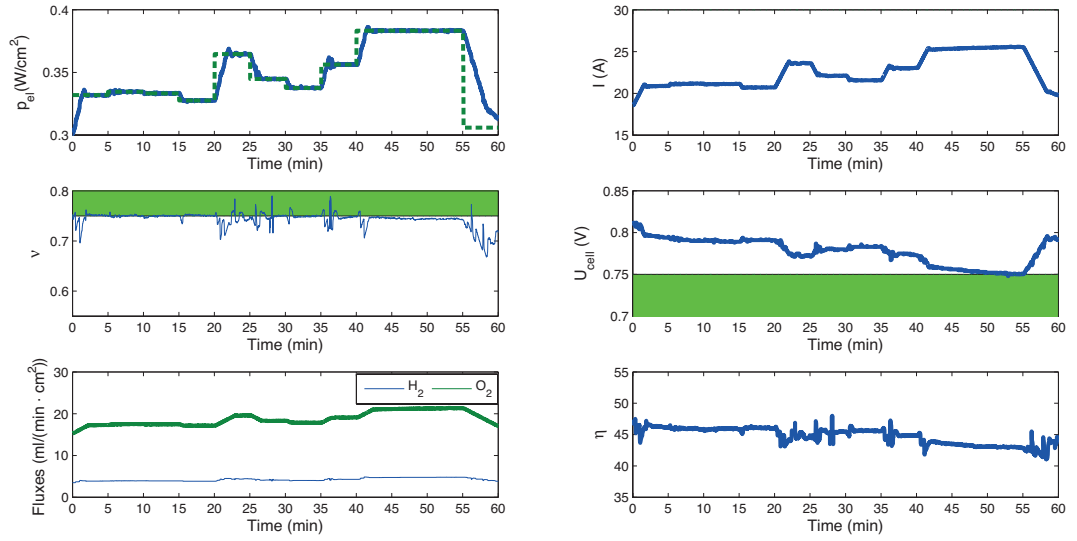


FIGURE 4.6 – RTO via constraint adaptation appliqué toutes les 10 secondes au stack expérimental.

## Discussion

Ces résultats, publiés en 2012 [26], dans leur version étendue mais résultant d’une étude initiée en 2010 [30], sont intéressants en ce qu’ils prouvent par l’exemple l’applicabilité de la méthode à des procédés réels. De plus, la correction des contraintes garantit que les contraintes *sur le vrai stack* sont satisfaites une fois la convergence atteinte. Des violations de contrainte peuvent apparaître au fur et à mesure des itérations, mais l’augmentation de la fréquence de ré-optimisation, rendue possible par la forte séparation d’échelles de temps entre les dynamiques électrochimiques et thermiques, apportent une réponse suffisante – du moins du point de vue de HTCeramix-SOFC Power. Il subsiste cependant des limitations, et notre objectif est de les combler d’ici la fin du projet industriel pour lequel nous avons obtenu un financement de la Commission pour la Technologie et l’Innovation. En premier lieu, si l’application de “RTO via Constraint Adaptation” garantit la satisfaction des contraintes du stack réel à convergence, il est nécessaire d’utiliser le schéma “RTO-MA” complet, i.e avec les modificateurs d’ordre 1, pour garantir que le bon ensemble de contraintes actives est détecté. Il est donc nécessaire d’estimer les gradients expérimentaux. Au moment de cette première étude, nous ne disposions pas encore de tous les outils discutés dans le chapitre précédent, et une des étapes à venir est d’utiliser certains de ces outils, notamment ceux de [20]. D’un point de vue pratique, ce n’était pas crucial, puisque on observait déjà que l’application de “RTO via constraint adaptation” permettait d’activer les contraintes qui correspondent aux contraintes actives à l’optimum prédites par l’analyse du fonctionnement

de ce type de piles [26].

De plus, il convient de s'assurer (i) que l'application de la méthode de RTO choisie va converger et (ii) que cette convergence s'effectue par le bon côté des contraintes. Une possibilité est d'appliquer les conditions suffisantes de faisabilité et d'optimalité discutées dans le chapitre précédent, notamment l'approche "projeter et filtrer" comme post-traitement des entrées calculées par l'algorithme de RTO choisi. Un premier essai a été réalisé l'été dernier, à charge constante, sur une pile non plus expérimentale, mais sur une pile industrielle. À charge constante, les premiers résultats montrent une croissance de l'efficacité du stack de 8% en une dizaine d'itérations de l'algorithme SCFO. La contrainte sur l'utilisation du fuel est activée en dix itérations, et la convergence a lieu du bon côté de la contrainte. La contrainte sur le potentiel de cellule est satisfaite pour toutes les itérations, et la charge demandée est atteinte en 3 itérations. Ce sont des résultats très prometteurs, qui seront très rapidement complétés par une étude en présence de variations de charge.

#### 4.2.4 Piles à combustible PEM

Récemment nous avons initié et obtenu un financement pour travailler à l'application des méthodes RTO à des piles à combustible de type PEM. Ce projet, en partenariat avec Béléos (holding du groupe Swatch), vise au développement de piles pour des applications automobiles, voire même au développement des véhicules équipés de cette pile à combustible (le Swatchgroup possède une certaine expérience via le développement de la Smart). Le véhicule disposera d'une batterie, la pile servant a priori à charger la batterie, voire à la suppléer si vide, pour étendre l'autonomie du véhicule. Ce travail n'est pas détaillé ici mais il implique aussi, notamment un post-doc et un autre doctorant du laboratoire d'automatique. À moyen terme il s'agira d'optimiser, au moyen des méthodes de RTO développées, le fonctionnement d'une pile de 10kW puis éventuellement d'une pile de 40kW en cours de développement.

#### 4.2.5 Production d'énergie au moyen de cerf-volants (Kites)

Produire de l'énergie au moyen de cerf-volants (Kites) est une idée qui a reçu une attention croissante durant les dix dernières années pour deux raisons principales : (i) l'énergie ainsi produite est renouvelable, puisque le vent en est la source et (ii) une voile attachée par exemple à une génératrice peut accéder à de hautes altitudes pour un prix beaucoup plus raisonnable qu'une turbine, puisqu'il est considérablement moins cher de rallonger le câble d'un kite que de construire une éolienne de plusieurs hecto-/kilomètres de haut. L'intérêt d'atteindre de hautes altitudes tient au fait qu'à cause des frottements entre l'air et le sol, il y a un gradient de vent sur les premières centaines de mètres de l'atmosphère,. De plus le vent est plus persistant, moins turbulent et plus fort à haute altitude. Un certain nombre de start-ups se sont récemment intéressées à cette technologie, et certaines proposent dès à présent des produits commerciaux. Ainsi "SkySails" (<http://www.skysails.info>) commercialise des systèmes

d'aide à la propulsion des bateaux pour lesquels l'utilisation d'un voile permet de réduire significativement la consommation de fuel. Les kites ont aussi de nombreux autres avantages, parmi lesquels une plus faible occupation du sol, là où un champ d'éoliennes nécessite une distance minimale fonction de la taille des éoliennes pour garantir que les turbulences autour d'une éolienne ne perturbent pas le fonctionnement des autres.

Un kite est une aile, comme les pales d'une éolienne, les ailes d'un avion ou les voiles d'un bateau. Pour pouvoir être utilisé pour produire de l'énergie, un kite est typiquement connecté à une génératrice par un système de câbles. Lorsque le câble se déroule, la génératrice produit de l'énergie, dont une partie seulement est consommée pour re-enrouler le câble. La trajectoire que la voile parcourt le long d'un cycle est donc critique, puisqu'elle conditionne directement la puissance nette produite. Comme toute technologie émergente, l'utilisation des kites doit prouver sa viabilité économique. Plusieurs entreprises et groupes de recherche travaillent sur le design de ces systèmes et ont proposé des solutions très diverses (différents types de génératrices, des voiles embarquant de mini-turbines, des systèmes de plusieurs voiles interconnectées, ...). En fait, nombre de ces designs ne ressemblent plus à une voile, même si le principe reste toujours le même : une ou plusieurs ailes supportée(s) par des câbles.

Dans le cadre de la thèse de Sean Costello (TD2), nous nous sommes intéressés à cette thématique, notamment eu égard à l'intérêt personnel de Sean pour le kite-surf. Nous nous y sommes intéressés car la détermination de la trajectoire cyclique que la voile doit suivre pour maximiser la puissance nette produite est en soi un problème d'optimisation dynamique. Le fait que cette trajectoire est cyclique, et que la voile doive la suivre de façon répétée ouvre la voie vers une résolution de ce problème par une approche de type run-to-run, que l'on peut requalifier de "cycle-to-cycle" dans ce cas particulier. Enfin, la modélisation d'un kite est une tâche difficile et les sources d'incertitude sont nombreuses. Ainsi les modèles disponibles, utilisables à des fins de contrôle et d'optimisation considèrent souvent que la voile est non-déformable, que sa masse est négligeable, ou que le câble est parfaitement tendu. De la même façon, le vent, même s'il est plus fort et plus régulier aux altitudes envisagées, varie sensiblement ce qui peut induire des changements de trajectoire optimale pour le kite. Un kite est donc un exemple de système dynamique répété pour lequel l'application des outils de l'optimisation dynamique classique, basée sur le modèle, est insuffisante. C'est donc un cas d'étude pour les méthodes d'optimisation en temps réel que nous développons.

### **Une borne pratique sur la puissance délivrable par un kite**

Notre première contribution consiste en la détermination de bornes supérieures pour la puissance théoriquement atteignable par un kite et par un système de voiles interconnectées. Pour aboutir à ce résultat, nous avons appliqué le principe du maximum de Pontryagin à un modèle de kite simplifié. Le problème d'optimisation considéré consiste à maximiser l'intégrale de la puissance générée au cours d'un cycle, avec comme contrainte que la trajectoire est bouclée, c'est à

dire qu'à l'issue de la trajectoire, le kite retourne à sa position initiale.

Une telle borne est déjà disponible dans la littérature si l'on considère un kite de masse négligeable et une attache de masse négligeable [94, 83]. Cette borne indique que la puissance maximale est proportionnelle au cube du module de la vitesse du vent fois le cube du cosinus de l'angle entre la force aérodynamique (i.e la résultante de la trainée et du lift), qui dans ce cas est alignée avec le câble. Mais à l'image de la limite de Betz pour les turbines, cette borne est de peu d'intérêt pratique, car aucun kite ne peut l'atteindre.

Nous avons établi que lorsque les masses susmentionnées ne sont pas négligeables, l'angle de la force aérodynamique avec le vent varie et la puissance maximale est en fait proportionnelle au cube du cosinus de l'angle entre la vitesse du vent et la *force aérodynamique moyenne* le long du cycle, et étendu ce résultat au cas de  $n$  voiles interconnectées. Cette borne est inférieure à la borne définie dans [94, 83], et est plus réaliste (puisque'elle considère a priori que les masses ne sont pas négligeables). Nous avons aussi montré comment elle pouvait être calculée et utilisée sur la base de la connaissance de paramètres de design élémentaires. Ces résultats sous la forme d'un théorème et de son corollaire, font l'objet d'un article de journal [39]

### RTO pour les kites

Comme mentionné dans la section 3.7.2, nous avons utilisé un modèle dynamique simplifié de kite utilisé pour tracter un bateau, pour illustrer l'applicabilité de la méthode proposée dans [41]. **Formulation du problème :**

Le problème d'optimisation consistait à déterminer la trajectoire optimale cyclique que la voile doit suivre, pour maximiser la force moyenne de traction dans le sens de déplacement du bateau, i.e. l'intégrale de la force de traction sur le bateau sur une période. La force de traction dans la direction de déplacement du bateau s'écrit :

$$T_F = T(\cos \theta \cos \beta + \sin \theta \sin \beta \sin \phi). \quad (4.11)$$

, les angles  $\theta$  et  $\beta$  sont définis par le choix d'un système de coordonnées sphériques et considèrent que le déplacement du bateau n'est pas nécessairement colinéaire au vent comme illustré par la figure 4.7.

Les trajectoires d'entrée et d'état  $u(t)$  et  $x(t) = [\theta(t) \ \phi(t) \ \psi(t)]^T$ , doivent être périodiques (le kite doit retourner à sa position initiale en fin de cycle). De plus, le kite doit voler à une hauteur minimale pour ne pas tomber dans l'eau en cas de perturbations.

Le problème d'optimisation dynamique pour le modèle nominal s'écrit [41] :

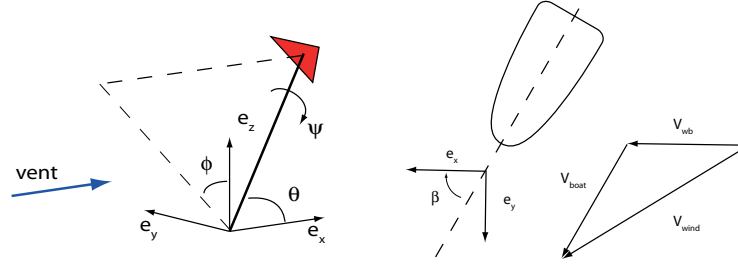


FIGURE 4.7 – Choix de coordonnées sphériques (à gauche) et digramme vectoriel illustrant comment est caclué le vent est perçu sur un bateau en déplacement.  $V_{wb}$  dénote le vent relatif au bateau,  $V_{wind}$  la vitesse du vent et  $V_{boat}$  la vitesse du bateau. Clairement  $V_{wb} = V_{wind} - V_{boat}$

$$\max_{\tilde{u}(t), t_f, x_0} \quad \overline{T}_F = \frac{1}{t_f} \int_0^{t_f} T_F dt \quad (4.12)$$

$$\text{subject to} \quad \dot{x} = \begin{bmatrix} \dot{\theta} \\ \dot{\phi} \\ \dot{\psi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{v_a}{L} \left( \cos \psi - \frac{\tan \theta}{E} \right) \\ -\frac{v_a}{L \sin \theta} \sin \psi \\ \frac{v_a}{L} \tilde{u} + \phi \cos \theta \end{bmatrix}, \quad (4.13)$$

$$v_a = v_0 E \cos \theta, \quad (4.14)$$

$$E = E_0 - \tilde{c} \tilde{u}^2, \quad (4.15)$$

$$T_F = (P_D A \cos^2 \theta (E + 1) \sqrt{E^2 + 1}) \times (\cos \theta \cos \beta + \sin \theta \sin \beta \sin \phi), \quad (4.16)$$

$$x(0) = x_0, \quad (4.17)$$

$$x(t_f) = x_0, \quad (4.18)$$

$$L \sin \theta \cos \phi \geq h_{min}, \quad (4.19)$$

avec  $t_f$  la durée du cycle,  $\overline{T}_F$  la force de traction moyenne,  $x_0$  l'état initial et  $h_{min}$ , la hauteur minimale acceptable pour le kite. Pour simplifier les écritures les substitutions suivantes ont été réalisées :

$$\tilde{u} = gLu, \quad (4.20)$$

$$\tilde{c} = \frac{c}{(gL)^2}. \quad (4.21)$$

Le vecteur de paramètres incertains de ce modèle est  $[\tilde{c}, v_0, E_0, \beta]^T$ .

La trajectoire nominale obtenue est représentée schématiquement dans la figure 4.8.

Nous avons considéré de l'incertitude sur la vitesse et la direction du vent et montré que ni l'une ni l'autre n'affectait la trajectoire optimale. En effet la vitesse du vent n'influence que le temps de parcours de la trajectoire et pas sa forme (car la dynamique est proportionnelle à  $v_0$ ), tandis que l'orientation du

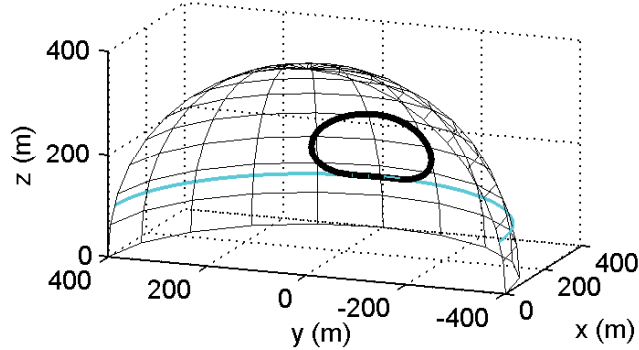


FIGURE 4.8 – Trajectoire nominale sur le quart de sphère sur lequel le kite est contraint. Le cercle horizontal bleu figure la contrainte de hauteur

vent influence l'orientation du câble et pas la trajectoire que doit suivre la voile autour de l'axe du câble.

Le paramètre du modèle qui influence le plus la trajectoire est sans aucun doute le coefficient  $\tilde{c}$ , introduit pour pénaliser les changements de direction lors du pilotage, car il a été observé expérimentalement que l'énergie produite par les systèmes de ce type était significativement diminuée lorsque les trajectoires suivies par la voile présentent des inflexions trop raides. C'est donc par rapport à ce seul paramètre, malgré la présence d'incertitude sur notamment la vitesse du vent et sur le cap du bateau qu'a été réalisé le développement en série de Taylor de l'équation 3.87 pour déterminer la direction de correction de la trajectoire nominale. Pour le scénario considéré dans [41] il a été possible de réduire la perte d'optimalité due à l'incertitude de 25% – lorsque le contrôleur suit la trajectoire nominale – à moins de 1%, lorsque la trajectoire est corrigée suivant l'équation 3.87. Pour cela il est nécessaire de réaliser un quinzaine de cycles. Il est intéressant de noter que la trajectoire nominale et la trajectoire convergée ont des formes très différentes, malgré le fait que l'adaptation ne se fait que suivant une seule direction de correction. La figure 4.9 montre l'évolution de la force de traction moyenne au fur et à mesure des cycles et l'évolution de la trajectoire que le kite a dû suivre.

#### Développement d'un dispositif expérimental :

Pour l'instant ce ne sont que des résultats préliminaires, mais il est envisagé d'appliquer la même approche à un système expérimental dont Sean a initié et supervisé (notamment au travers de plusieurs projets étudiants) la construction. Deux photos de ce système expérimental, pour l'instant pilotable au joystick mais pas encore contrôlable en boucle fermée, sont présentées ci-après.

Nous avons décidé de proposer le modèle de ce dispositif expérimental comme benchmark pour des problèmes de commande avancée et d'optimisation. En

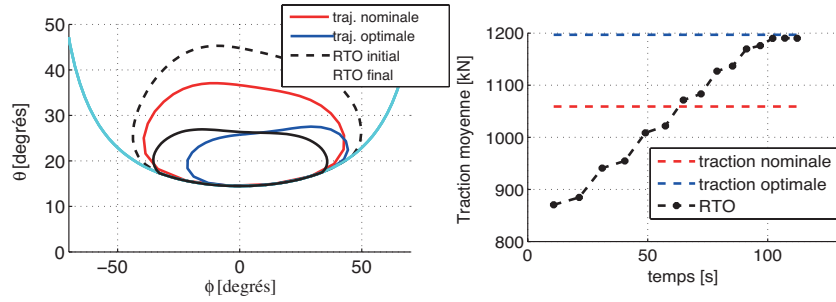


FIGURE 4.9 – Evolution de la traction moyenne le long des cycles (gauche) et de la trajectoire suivie par le kite (droite)

fait deux modèles ont été développés dont les performances sont acceptables par rapport aux mesures obtenues sur le dispositif expérimental tout comme par rapport aux performances des simulateurs disponibles les plus complexes (qui ne peuvent en l'état servir pour tester des méthodes de commande avancée). L'intérêt d'avoir deux modèles est encore une fois de pouvoir en utiliser un pour le design des méthodes de commande ou d'optimisation et l'autre comme réalité simulée, ce qui permet d'estimer la qualité des méthodes en présence d'incertitude. Pour l'instant un rapport et les fichiers de simulations ont été déposés en archive ouverte [43], et une version synthétique du rapport a été soumise comme publication dans un journal [?].

### 4.3 Utilisation du solver SCFO pour le réglage itératif de contrôleurs

Dans le chapitre précédent il a été fait référence à l'utilisation du solver SCFO pour le réglage itératif de contrôleurs, et notamment du réglage run-to-run des paramètres d'un régulateur de type MPC pour la commande en température d'un cristalliseur batch expérimental [21]. Ce cristalliseur est un excellent exemple de l'utilisation potentielle du solver, et plus généralement des méthodes de RTO pour le réglage itératif de contrôleurs. Un procédé de cristallisation batch est généralement contrôlé en température puisqu'un changement de température permet typiquement de traverser la courbe de solubilité et donc de forcer la cristallisation. Dans le cas des procédés de cristallisation batchs, une trajectoire de température est définie, qui doit être suivie pour assurer l'efficacité de l'opération. Pour cela, il est nécessaire de dimensionner un contrôleur qui va s'assurer que la température du cristalliseur suit bien sa trajectoire de référence. Ici on considère le contrôleur MPC de [25]. Ses performances dépendent du choix d'un certain nombre de paramètres de dimensionnement : le poids de l'erreur de suivi de la trajectoire, le gain de filtre du biais, l'horizon de commande et l'horizon de prédiction. Si l'on considère que ces paramètres



FIGURE 4.10 – 2 Photos du prototype de Kite expérimental en cours de construction

sont fixés en début de batch et que les performances de suivi de trajectoire sont mesurées à l'issue du batch, la relation entre les paramètres du régulateur et les performances peut être vue comme un mapping statique. Si le batch est répété dans le temps, alors l'application des méthodes de RTO peut permettre d'optimiser les performances en changeant, de batch en batch les paramètres du contrôleur MPC. Si pour cela on utilise le solveur SCFO, la manipulation



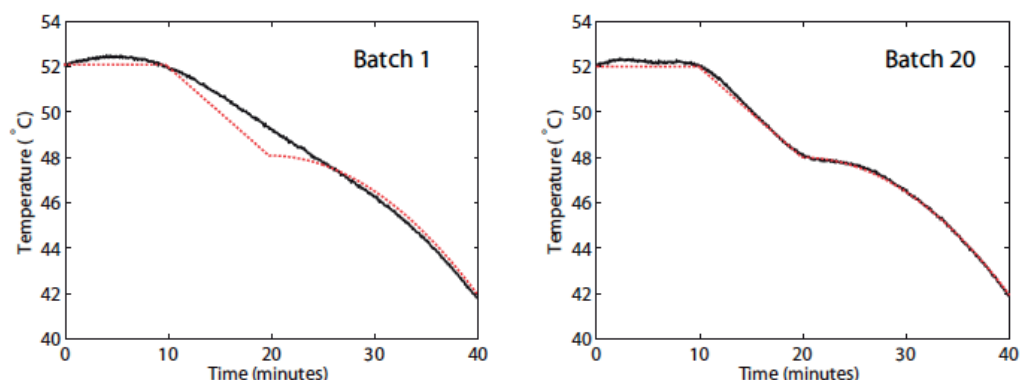


FIGURE 4.11 – Application du solveur SCFO au réglage itératif d’un contrôleur MPC pour un cristalliseur expérimental

des paramètres du contrôleur est réalisée avec la garantie de décroissance de la fonction coût (stricte, dans le cas idéale) et du respect des contraintes.

Régler les paramètres d’un régulateur en utilisant les méthodes d’optimisation en temps réel n’a jamais été proposé, en l’état de nos connaissances. C’est du reste la contribution principale de [21], où 4 exemples d’application sont présentés, deux simulés et deux expérimentaux – parmi lesquels le régulateur MPC discuté ci-dessus.

À titre d’exemple, la figure 4.11 illustre l’amélioration en 20 batches du suivi de la consigne en température du cristalliseur, dans le cas où le poids de l’erreur de suivi de la trajectoire et le gain de filtre du biais sont adaptés de batch en batch au moyen du solveur SCFO.

L’approche fonctionne aussi très bien lorsque les 4 paramètres du contrôleur sont réglés. A noter que, dans la grande majorité des cas, l’essentiel de l’amélioration a lieu durant les toutes premières itérations.

## 4.4 Modélisation commande et optimisation pour le traitement du diabète

Dans ce chapitre sont présentés des résultats obtenus dans le cadre de la thèse d’Alain Bock (TD1), que j’ai co-encadré avec le Dr. Denis Gillet, MER, de l’EPFL (soutenance le 18 décembre 2013). Les contributions présentées ci-après ont été séparées du reste du document car elles ne s’inscrivent pas dans le champ thématique de l’optimisation des procédés. Cependant, et sans sous-entendre qu’un patient atteint du diabète puisse être assimilé de quelque manière que ce soit à un procédé, les points communs avec ce qui constitue le cœur de mes activités de recherche sont nombreux. Précisons tout d’abord que ce projet a été

intégralement financé par une société multinationale pharmaceutique, et qu'à ce titre, le processus de publications des résultats est passablement ralenti, puisqu'à chaque communication la question d'un dépôt de brevet préalable se pose. Il n'est pas toujours facile de publier dans ces conditions, mais nos partenaires industriels ont été ici exemplaires, en dépit des complications induites par une récente restructuration des activités de recherche de l'entreprise en Suisse et à l'international. Il reste que certains des résultats ci-après sont restés longtemps bloqués dans le processus d'évaluation de l'entreprise, et sont donc toujours dans le processus d'évaluation des journaux auxquels ils ont été soumis, plusieurs mois après la soutenance d'Alain Bock.

L'objectif général de ce projet est de construire des outils, notamment des modèles, qui permettent de proposer des recommandations d'injection d'insuline, pour des patients atteints de diabète de type I Mellitus. Le ou les modèle(s) développé(s) a(ont) pour vocation d'être utilisé(s) pour le contrôle en temps réel des shots d'insuline, notamment avant ou après les repas, qui s'ajoutent à l'injection de base d'insuline, continue, rendue possible notamment par l'utilisation de pompes à insuline automatique. L'idéal serait, bien sûr, de réaliser ces injections de façon *optimale*, c'est à dire, injecter la quantité minimale d'insuline qui permette de maintenir le taux de sucre dans le sang entre ses bornes pendant une période de temps (future). Ces travaux sont très amont et même si des essais de commande optimale ont déjà été réalisés en simulation [109] au moyen de données réelles provenant d'une étude clinique, nous avons vite réalisé que les modèles disponibles dans la littérature n'étaient souvent pas *adéquats* par rapport à leur utilisation envisagée, à savoir la prédiction et le contrôle optimal de la glycémie. *L'incertitude* est dominante en ce que d'un patient à l'autre, même si les repas et l'activité physique sont absolument identiques (par ex. lors d'une étude clinique), la réponse physiologique à la même politique d'injection d'insuline varie significativement. C'est la variabilité "inter-patient". De plus, un patient qui ingère les mêmes repas, pratique la même activité physique et s'injecte les mêmes profils d'insuline pendant plusieurs jours consécutifs (par exemple en environnement clinique), présente fréquemment des profils de glycémie différents. C'est la variabilité "intra-patient", et c'est sans doute celle qui pose le plus de problèmes aux thérapeutes, comme aux personnes qui envisagent de construire des modèles.

Malgré cela, beaucoup de modèles sont disponibles dans la littérature dont certains seront mentionnés ci-après. Le véritable point commun entre ce travail de recherche et les reste de mes activités, réside dans la notion de modèle adéquat, i.e. dans la tentative de construire un modèle dynamique ayant des propriétés particulières : (i) être identifiable avec des mesures de glycémie uniquement, (ii) être capable de prédire des phénomènes observés – actuellement non prédictibles par les modèles de la littérature, (iii) avoir des capacités de prédiction de la glycémie accrues et (iv) s'appuyer sur des paramètres corrélés ou corrélables avec les injonctions thérapeutiques. C'est, dans l'esprit, similaire à la construction d'approximations convexes pour garantir l'adéquation du modèle pour son utilisation pour RTO-MA. Le contexte, et la présence d'incertitude, est aussi très similaire, même si dans le cas du diabète la situation est sans doute

encore plus critique.

#### 4.4.1 Le diabète de type I

Le diabète de Type 1 mellitus est une maladie autoimmune qui détruit les  $\beta$  cellules qui produisent l'insuline pour les patients sains. L'insuline est une hormone qui stimule le stockage du sucre dans le foie et dans les cellules lorsque la glycémie est élevée. La deuxième hormone gluco-régulatrice est le glucagone, une hormone hyperglycémiant, elle aussi sécrétée par le pancréas, qui stimule la libération de sucre depuis le foie vers le sang, lorsque la glycémie est basse. Pour un diabétique, le manque d'insuline conduit invariablement à des concentrations de sucre dans le sang, i.e. glycémies (BG) élevées. On parle alors d'hyperglycémie, condition médicale à l'origine de nombreuses autres conditions : maladies vasculaires, perte de la vue, dommages nerveux, ... [35].

Le diabète de type I est traité au moyen d'injections d'insuline exogène qui est substituée ainsi à la production endogène d'insuline, défaillante. Si l'insuline animale (porc et bœuf principalement) a longtemps été majoritairement utilisée – ce qui impliquait le prélèvement du pancréas de l'animal et une étape complexe de purification –, l'insuline est produite par voie bactérienne depuis les années 1980. L'introduction du gène humain codant la synthèse de l'insuline dans des bactéries (*E. coli*) a permis la production en masse d'insuline par l'industrie pharmaceutique et représente un des tous premiers grands succès du génie génétique. La quantité d'insuline à injecter au moyen d'une seringue, d'un stylo ou d'une pompe doit cependant être calculée avec précaution car une overdose d'insuline conduit à de faibles valeurs de BG, ce qui peut causer l'évanouissement, le coma ou la mort.

Prévenir les risques d'hyper- ou d'hypoglycémie est une tâche rendue complexe par la grande variabilité de la capacité et de la vitesse d'absorption, ainsi que de l'effet de l'insuline entre plusieurs patients, mais aussi chez un seul patient [80]. Ainsi prédire le BG est un challenge mais reste un problème intrinsèquement critique car la plupart de thérapies s'appuient de façon directe ou indirecte sur la prédiction de BG. En conséquence, le développement de modèles fiables qui puissent être utilisés pour des recommandations d'injections, pour le contrôle de BG en boucle fermée voire simplement à des fins pédagogiques est un champ de recherche très actif. Beaucoup de modèles sont à présent disponibles dans la littérature, parmi lesquels les plus utilisés sont indubitablement les modèles compartimentaux. Ces modèles présentent des capacités de prédiction acceptables pour autant qu'ils puissent être personnalisés [58] et leur complexité varie du plus simple [6] au plus compliqué [85, 45]. Cependant, pour les personnaliser, il est nécessaire de disposer de mesures autres que BG, comme par exemple la concentration d'insuline ou de traceurs, ce qui est rarement le cas. D'où l'intérêt de modèles identifiables pour chaque patient (et donc personnalisables) sur la base de la mesure de la glycémie. C'est une des raisons qui expliquent l'émergence de modèles paramétriques auto-récursifs [57] ou encore l'utilisation des réseaux de neurones [46]. Cependant, ces modèles présentent le défaut majeur que leurs paramètres ne peuvent pas être reliés à des quantités

physiques observables, et l’invraisemblance de ces paramètres ne donc pas être facilement détectée. Il en résulte que l’utilisation de la plupart des modèles de BG peut s’avérer risquée.

Dans le cadre de sa thèse (TD1), Alain Bock a proposé un nouveau modèle compartimental, linéaire et identifiable sur la base de mesures de BG.

#### 4.4.2 Le modèle basé sur les paramètres “TPM”

##### Construction du modèle

À l’origine de la plupart des modèles compartimentaux de complexité faible à modérée, on retrouve très souvent le modèle minimal de Bergman (BMM). Ce modèle a été initialement construit pour analyser l’effet de l’insuline [7, 6] mais reste toujours utilisé pour prédire le BG et tester – en simulation – des méthodes de contrôle commande [36, 107, 103].

J’ai moi-même utilisé ce modèle durant ma thèse, comme exemple illustratif de l’analyse de convergence d’une méthode de contrôle run-to-run [68]. Dans sa forme la plus simple ce modèle s’écrit :

$$\frac{dG(t)}{dt} = -X(t)G(t) - S_G G(t) + U_{endo} \quad (4.22)$$

$$\frac{dX(t)}{dt} = -p_2(X(t) - S_I I(t)) \quad (4.23)$$

avec  $G$  qui figure la concentration de BG ( $mg \cdot dl^{-1}$ ),  $X$  l’action de l’insuline ( $min^{-1}$ ),  $S_G$  l’efficacité du glucose en absence d’insuline ( $min^{-1}$ ),  $S_I$  la sensibilité de l’insuline ( $U^{-1} \cdot min^{-1} \cdot l$ ),  $U_{endo}$  la production endogène de glucose  $mg \cdot dl^{-1} \cdot min^{-1}$ , et  $p_2$  l’inverse de la constante de temps de l’action de l’insuline  $min^{-1}$ . Enfin,  $I$  représente la concentration d’insuline dans le plasma  $U/l$ .

Simple et largement accepté le BMM nécessite cependant des sous-modèles pour les repas, la dynamique de l’insuline et éventuellement, l’activité physique. Pour ce dernier point, nous avons proposé un sous-modèle [11]. Ce modèle souffre en plus du fait qu’il n’est identifiable qu’avec de la connaissance a priori [108] ou si  $I(t)$  est mesuré [89].

L’une des premières contributions de cette thèse – du moins pour ce qui concerne la modélisation – a été de proposer une extension du BMM [109], pour laquelle l’action de l’insuline et son absorption sont rempacés par une dynamique du 2<sup>ème</sup> ordre et en incorporant le sous-modèle d’ordre 2 de Hovorka [84], pour tenir compte de l’ingestion d’hydrates de carbone [109].

Cependant, les capacités de prédiction de cette première extension [109] étaient toujours non satisfaisantes. Deux faiblesses principales de cette extension ont été identifiées, qui sont en partie responsables :

1. Pendant longtemps, les médecins considéraient que plus haut est le BG, plus forte est l’action de l’insuline (et vice-versa). C’est ce qui justifie le terme bilinéaire  $-X(t)G(t)$  du BMM. Depuis 1985 [120], l’effet opposé a été observé,

2. Le BMM, comme l'extension de [109] et d'ailleurs, comme pratiquement tous les modèles les plus utilisés prédisent qu'un patient en situation d'hyperglycémie sévère qui ne prend pas de mesures thérapeutiques pour remédier à son état, reviendra à une valeur de BG normale. Or, le contraire a été observé.

Pour remédier au premier problème, le plus simple est de linéariser le terme bilinéaire  $-X(t)G(t)$ . C'est, par ailleurs, aussi intéressant dans l'objectif de dimensionner des contrôleurs [81] et plusieurs versions linéarisées du BMM sont disponibles. Mais aucune n'est réellement satisfaisante pour le fitting de données cliniques [55], comme pour la prédiction de la glycémie [107].

Nous présentons ci-après le "LMM", version linéarisée du BMM de [12] :

$$\frac{dG(t)}{dt} = -X(t) - S_G G(t) + U_{endo} + U_G(t) \quad (4.24)$$

$$\frac{dU_G(t)}{dt} = \dot{U}_G(t) \quad (4.25)$$

$$\frac{d\dot{U}_G(t)}{dt} = -2a_g \dot{U}_G(t) - a_g^2 U_G(t) + K_g a_g^2 U_{CHO}(t) \quad (4.26)$$

$$\frac{dX(t)}{dt} = -a_x X(t) + a_x X_1(t) \quad (4.27)$$

$$\frac{dX_1(t)}{dt} = -a_x X_1(t) + K_x a_x U_I(t) \quad (4.28)$$

avec  $U_G$  qui représente la concentration en glucose dans l'intestin ( $g \cdot min^{-1}$ ),  $\dot{U}_G$  sa 1<sup>ère</sup> dérivée temporelle ( $g \cdot min^{-2}$ ), et  $X_1$  l'action intermédiaire de l'insuline ( $min^{-1}$ ). Le LMM introduit de nouveaux paramètres : la sensibilité au repas  $K_g$  ( $mg \cdot dl^{-1} \cdot g^{-1}$ ), l'inverse de la constante de temps du repas  $a_g$  ( $min^{-1}$ ), la sensibilité à l'insuline  $K_x$  ( $mg \cdot dl^{-1} \cdot U^{-1}$ ) (différente de  $S_I$ ), et l'inverse de la constante de temps d'absorption/action de l'insuline  $a_x$  in  $min^{-1}$ .

Les entrées manipulables sont l'infusion sous-cutanée d'insuline  $U_I$  ( $U \cdot min^{-1}$ ) et le taux d'ingestion des CHO, i.e. d'hydrates de carbone,  $U_{CHO}$  ( $g \cdot min^{-1}$ ).

### Le “Therapy parameter-based model” (TPM)

Le TPM est en fait une extension du LMM, pour laquelle  $U_{endo}$  et  $S_G$  sont supprimés :

$$\frac{dG(t)}{dt} = -X(t) + U_G(t) \quad (4.29)$$

$$\frac{dU_G(t)}{dt} = \dot{U}_G(t) \quad (4.30)$$

$$\frac{d\dot{U}_G(t)}{dt} = -2a_g\dot{U}_G(t) - a_g^2U_G(t) + K_g a_g^2 U_{CHO}(t) \quad (4.31)$$

$$\frac{dX(t)}{dt} = -a_x X(t) + a_x X_1(t) \quad (4.32)$$

$$\frac{dX_1(t)}{dt} = -a_x X_1(t) + K_x a_x U_I(t) \quad (4.33)$$

Cette suppression conduit aux propriétés dynamiques suivantes :

- Après une injection d’insuline ou un repas, le BG évolue comme un système dynamique du 2<sup>d</sup> ordre.
- Le BG en régime permanent  $G_{ss}$  ne dépend que de  $K_x$ ,  $K_g$ , et du BG initial :

$$G_{ss} = G(0) - K_x U_{I,tot} + K_g U_{CHO,tot} \quad (4.34)$$

avec  $G(0)$  le BG initial,  $U_{I,tot} = \int_0^{t_f} U_I(t)dt$  la quantité totale d’insuline infusée entre  $t = 0$  et  $t = t_f$ , et  $U_{CHO,tot} = \int_0^{t_f} U_{CHO}(t)dt$  la quantité de CHO inérée entre  $t = 0$  et  $t_f$ .

- Les sensibilités sont découplées de leurs constantes de temps correspondantes.
- Le nombre de paramètres à identifier est réduit à quatre, contre six pour le LMM.

Le modèle obtenu est relativement similaire à celui de Percival et al. [106], qui considérait des comportements de premier ordre avec retard pur. La différence est que le TPM présente des profils de BG lisses, ce qui est plus réaliste, et qu’il n’y a pas de retard pur – difficile à identifier [106]. Dans le même article, l’analyse de corrélation ne souligne pas non plus de corrélation avec les paramètres thérapeutiques.

Paramètres thérapeutiques :

Les patients atteints de diabète de type 1 suivent les recommandations suivantes :

- Mesurer le BG au doigt (“fingerstick”) avant un repas (noté  $G_m$ ) ou s’il suspectent que le BG a augmenté,
- Comparer  $G_m$  au BG de consigne ( $G_t$ ), et calculer la différence :  $\Delta G = G_m - G_t$ ,
- Calculer la correction  $I_{corr} = \Delta G / CF$ , avec  $CF$  un facteur de correction exprimé en  $mg \cdot dl^{-1} \cdot U^{-1}$ .

- Calculer la correction  $I_{meal} = I2C \cdot CHO$ , avec  $I2C$  le rapport insuline/CHO en  $U \cdot g^{-1}$ , et  $CHO$  la masse de CHO  $g$ .
- Injecter  $I = I_{corr} + I_{meal}$  au moyen de la pompe, d'un stylo ou d'une seringue.

En fait,  $CF$  et  $I2C$  sont les paramètres thérapeutiques fixés par le médecin.  $CF$  quantifie la chute de BG en régime permanent par unité d'insuline et  $I2C$  indique combien d'insuline devrait être injectée par gramme de CHO consommée.  $MS = I2C \cdot CF$  peut donc être définie comme la sensibilité au repas, i.e. l'augmentation de BG/gramme de CHO.

**Correspondance entre les paramètres du TPM et les paramètres thérapeutiques :**

Cette correspondance, qui constitue a contribution majeure de [12] est résumée par les deux propositions suivantes :

**Proposition 1**

*Le paramètre  $K_x$  du TPM est égal au paramètre thérapeutique  $CF$ .*

**Démonstration:** Si 1U d'insuline est infusée à  $t = 0$ ,  $U_I(s) = 1$  et en l'absence d'autres injections et repas,  $CF$  s'écrit (d'après 4.4.2) :

$$CF = -(G(\infty) - G(0)) \quad (4.35)$$

avec  $G(\infty)$ , le BG en régime permanent et  $G(0)$  le BG initial.

$$G(s) = -\frac{K_x}{s \left(1 + \frac{1}{a_x} s\right)^2} U_I(s) + \frac{1}{s} G(0) \quad (4.36)$$

Le théorème de la valeur finale donne :

$$\begin{aligned} G(\infty) &= \lim_{s \rightarrow 0} sG(s) \\ &= -\lim_{s \rightarrow 0} \frac{K_x}{\left(1 + \frac{1}{a_x} s\right)^2} - G(0) \\ &= -K_x - G(0) \end{aligned}$$

Et :

$$K_x = -(G(\infty) - G(0)) = CF \quad (4.37)$$

ce qui conclut la preuve.

**Proposition 2**

*Le paramètre  $K_g$  du TPM est égal au paramètre thérapeutique  $MS$ .*

**Démonstration:** Si 1g de CHO est consommé à  $t = 0$  et en l'absence d'autres injections et repas,  $MS$  s'écrit (d'après 4.4.2) :

$$MS = G(\infty) - G(0) \quad (4.38)$$

Le reste de la preuve est similaire à celle de la Proposition 1.

Ainsi les paramètres du modèle TPM  $K_x$  et  $K_g$  correspondent *par construction* aux paramètres thérapeutiques. Ces derniers pouvant être interprétés comme les paramètres d’un modèle linéaire statique (entre l’injection d’insuline/l’ingestion de CHO et le BG), le TPM peut être vu comme une extension dynamique des prescriptions thérapeutiques. C’est un avantage indéniable, et notre partenaire industriel espère qu’il sera plus facilement adopté par les médecins pour cette raison. Un autre avantage est que les prescriptions thérapeutiques peuvent servir de valeurs de références – voire de conditions initiales – pour l’identification du TPM.

#### 4.4.3 Validation du TPM

Dans [12], le TPM a été validé sur la base d’une étude clinique ouverte, similaire à celle de [109]. Parallèlement, comme le nombre de patients est toujours limité et que la Foods and Drugs Administration a récemment approuvé le simulateur UVa-Padova pour le remplacement des tests sur les animaux dans le contexte du contrôle en boucle fermée du BG, nous avons utilisé ce simulateur, basé largement sur le modèle de Dalla Man et al. [45], pour générer des “patients virtuels”, sur lesquels tester la validité et la capacité de prédiction du TPM.

##### Critères d’analyse :

La littérature du diabète est très riche en indicateurs [49]. Trois ont été retenus, pour comparer le BMM, le LMM et le TPM.

##### “Mean Absolute Difference” (MAD) :

Le MAD est utilisé pour comparer les résultats de régression comme les qualités de prédictions :

$$\text{MAD} = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N |G(t) - \hat{G}(t)| \quad (4.39)$$

avec  $N$  qui figure le nombre d’échantillons.

##### Le coefficient de détermination :

Ce coefficient, noté  $R^2$  s’écrit (en %) :

$$R^2 = 100 \left( 1 - \frac{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (G(t) - \hat{G}(t))^2}{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (G(t) - \bar{G})^2} \right) \quad (4.40)$$

avec  $\bar{G}$ , le BG moyen  $\bar{G} = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N G(t)$ . 100% est le score idéal, du fit parfait, et  $R^2$  peut prendre des valeurs négatives.

##### La grille d’analyse d’erreurs (EGA) :

Ce critère est retenu car il est utilisé pour quantifier les performances des capteurs de glycémie [33]. Ainsi, pour les prédictions, si l’on considère qu’une prédiction de BG est homogène à une “mesure de BG dans le futur”, il est opportun d’utiliser le critère appliqué aux capteurs. L’EGA propose différentes zones en fonction de la qualité du capteur :



	TPM	LMM	MM
MAD (mg/dl)	6.91	4.94	5.26
$R^2$ (%)	89.6	94.8	94.0

TABLE 4.1 – Valeurs de MAD et  $R^2$  moyennées sur tous les patients virtuels (UVa).

	Facteur de correction	Insulin/CHO	Sensibilité aux repas
MM	0.77(0.014)		0.62 (0.075)
LMM	0.86 (0.0028)	0.99 ( $9.76 \cdot 10^{-7}$ )	0.69 (0.038)
TPM	0.90 (0.00078)	0.99 ( $1.01 \cdot 10^{-7}$ )	0.74 (0.023)

TABLE 4.2 – Facteurs de corrélation et valeurs p (probabilité de commettre une erreur de première espèce, i.e. rejeter à tort l’hypothèse nulle et donc d’obtenir un faux positif)

- Pour qu’une mesure soit “cliniquement précise”, elle ne doit pas dévier de plus de 20% de la valeur réelle, auquel cas elle est classée en zone A de l’EGA. Si 95% des mesures sont en zone A, le capteur de BG atteint les standards de la norme ISO 15197. Cependant, la plupart des capteurs de BG n’y parviennent pas [74].
- Une mesure est “cliniquement appropriée”, si elle classée en zone A et B.
- Toutes les autres zones sont potentiellement dangereuses.

Evidemment, l’objectif est d’avoir le plus de prédictions possibles en zones A et B.

#### TPM vs. simulateur UVa

##### Fitting des données :

La structure du TPM diffère du BMM et du LMM principalement par l’absence de production de glucose endogène et d’efficacité du glucose à zéro insuline, ce qui se traduit par un comportement différent, notamment en régime permanent. Le simulateur UVa a cependant le même comportement en régime permanent que les modèles BMM et LMM. On s’attend donc à ce que le TPM soit moins performant pour le fitting de données générées par le simulateur UVa, d’autant plus que le TPM a moins de paramètres que les autres, ce qui est confirmé par le tableau 4.1. Le BMM et le LMM présentent des performances similaires, et le TPM est légèrement moins performant.

Bien sûr de bonnes capacités de fitting n’impliquent pas nécessairement pour un modèle de bonnes capacités de prédiction.

##### Analyse de corrélation :

Les résultats sont résumés dans le tableau 4.2.

Dans tous les cas, le TPM présente de meilleurs facteurs de corrélation et valeurs p que le BMM et le LMM.

##### Prédictions de BG :

La figure 4.12 compare les capacités de prédictions du BMM, du LMM et

du TPM. Est aussi inclus le modèle “Zero-Order Hold (ZOH)” qui sert ici de référence. MAD sert d’indicateur de qualité du fit de la prédiction et pour quantifier les risques pour le patient, le critère EGA (% en zone A) est aussi présenté.

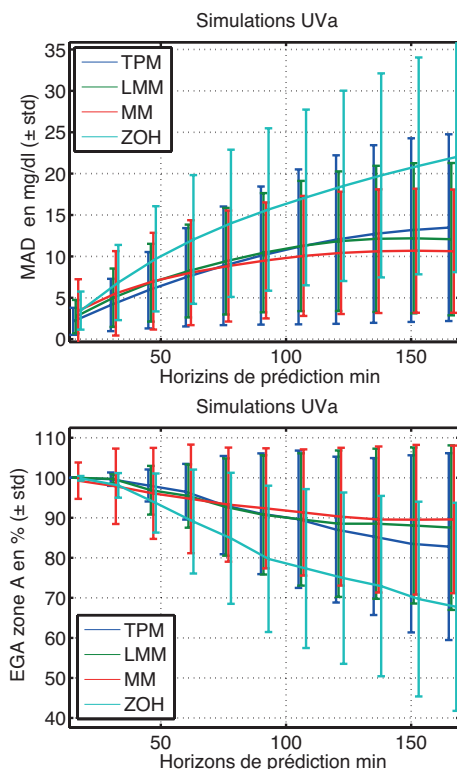


FIGURE 4.12 – MAD (haut) et % en EGA zone A (bas) des valeurs moyennées des prédictions par les différents modèles, pour différents horizons de prédictions par rapport au simulateur UVa.

Pour des horizons de prédictions courts ( $< 60\text{min}$ ), le TPM surpasse les autres modèles. Lorsque  $h$  augmente, ce n’est plus le cas. C’est bien sûr causé par le fait que le modèle de Dalla Man à la base du simulateur UVa a un comportement en régime permanent similaire à celui des modèles BMM et LMM. Rappelons que le comportement en régime stationnaire prédit par le BMM, notamment le retour à une glycémie normale après une hyperglycémie prolongée sans actions compensatrices, est rejeté par la grande majorité des thérapeutes.

## Validation par rapport aux données cliniques

### Fitting de données :

Le tableau 4.3 compare les performances du TPM, du LMM, et du BMM (indicateurs MAD et  $R^2$ ).

	TPM	LMM	MM
MAD in mg/dl	12.89	10.56	12.09
$R^2$ in %	72.42	81.16	76.15

TABLE 4.3 – Indicateurs MAD et  $R^2$  (moyennés sur tous les patients) pour le fitting de données cliniques.

	Facteur de correction	Insulin/CHO	Sensibilité aux repas
MM	0.16 (0.67)		0.57 (0.09)
LMM	0.47 (0.17)	0.78 (0.0077)	0.52 (0.13)
TPM	0.89 (0.00055)	0.89 (0.00055)	0.85 (0.002)

TABLE 4.4 – Facteurs de corrélation et valeurs p.

Comme prévu le TPM est légèrement inférieur pour le fitting de données cliniques, ce qui est, comme dans le cas du fitting des données du simulateur UVa, causé par la diminution du nombre de paramètres.

#### Analyse de corrélation :

Le tableau 4.4 analyse la corrélation des paramètres des différents modèles par rapport aux paramètres thérapeutiques des données cliniques.

Les résultats sont ici très clairs. La corrélation est très largement supérieure pour le TPM, ce qui compense largement la diminution de qualité de fitting. Les résultats du BMM, qui est sans doute le modèle le plus utilisé pour les études de contrôle de BG en boucle fermée sont d'ailleurs inquiétants car elles indiquent que son utilisation peut conduire à une grande surestimation des quantités d'insuline à injecter [12].

#### Prédictions de BG :

Comme l'illustre la figure 4.13, la valeur moyenne de MAD pour le TPM et LMM sont similaires. Le BMM présente des résultats pires que le ZOH pour des horizons courts. En moyenne, 97% des prédictions avec TPM et le LMM sont en zones A et B.

#### Synthèse

Au final, le TPM présente des résultats acceptables pour le fitting, des prédictions similaires ou meilleures, mais surtout une forte corrélation avec les paramètres thérapeutiques, ce qui est résumé dans le tableau 4.5.

Ainsi on dispose d'un modèle "taillé" pour l'estimation d'état, pour la commande prédictive ou encore pour développer des méthodes de recommandation automatique.

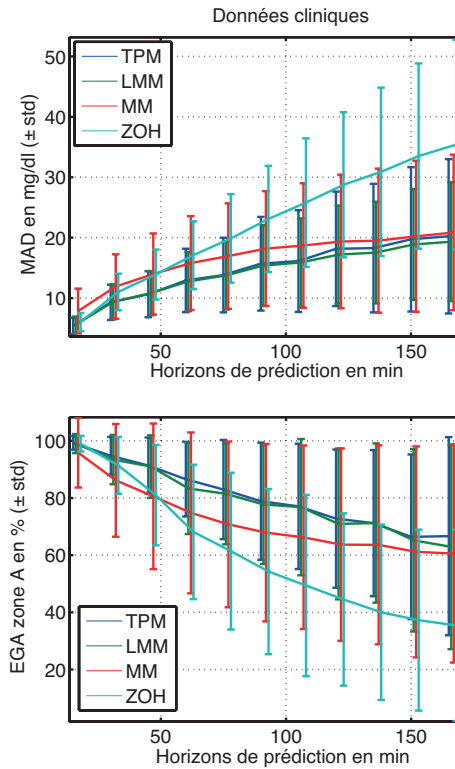


FIGURE 4.13 – MAD (haut) et % EGA en zone A (bas) des prédictions par les différents modèles pour des données cliniques.

	MM	LMM	TPM
Simplicité	✓	✓	✓
Fits acceptables	✓	✓	✓
Identifiabilité	×	✓	✓
Linéarité	×	✓	✓
Prédictions acceptables	×	✓	✓
Corrélation avec les paramètres de thérapie	×	×	✓
Paramètres à identifier	6	6	4

TABLE 4.5 – Tableau de comparaisons des propriétés des différents modèles.

### Extension stochastique

Cette section ne présente pas de résultats, mais les grandes lignes des derniers développements de la thèse d'Alain Bock (TD1). Les résultats sont restés confidentiels pendant longtemps car notre partenaire industriel étudiait la possibilité de dépôt de brevet avant que nous ayons le droit de les soumettre pour publication dans journal [13], et de les intégrer au manuscrit de thèse d'Alain

Bock [10].

Pour traiter de la variabilité inter-patient, on propose d'utiliser le TPM comme la partie déterministe d'un modèle stochastique.

Pour cela, au lieu de considérer des paramètres déterministes, les paramètres sont supposés normalement distribués autour de leur valeur déterministe :

$$\Theta \sim \mathcal{N}(\theta, \mathbf{Q}) \quad (4.41)$$

$$\sim \theta + \mathbf{w}(t) \quad (4.42)$$

A chaque paramètre  $\theta_i$  est ajouté un terme Gaussien et  $\Theta_i = \theta_i + w_i$ , avec  $\mathbf{w} = [w_1 \dots w_p]^T$  de covariance  $\mathbf{Q}$ . En propageant l'incertitude avec la théorie du filtre de Kalman étendue a été appliquée, nous avons pu obtenir des intervalles de confiance autour des prédictions de BG. Comme pour le TPM, une validation a été réalisée sur la base de patients réels (étude clinique) et virtuels (UVa). Malheureusement (contrairement à ce que l'on obtiendrait si toutes les hypothèses été vérifiées), plus de 5% des prédictions de cas cliniques sont à l'extérieur de l'intervalle de confiance à 95 %. La cause principale est que la distribution du bruit de mesure des données cliniques n'est pas Gaussienne.

Cependant ces premiers résultats sont très encourageants, et dans une autre étude, aussi confidentielle pour l'instant, nous avons montré qu'utiliser cette information sur les intervalles de confiance dans le cadre du contrôle du BG en boucle fermée réduisait significativement les risques d'hypo- et d'hyperglycémie.

### Un nouveau contrôleur de glycémie (TPC)

La synthèse d'un contrôleur de glycémie (TPC), non détaillé dans ce manuscrit, basé sur le TPM et qui utilise l'extension stochastique pour construire un filtre (TPF) pour les mesures de glycémie, et la comparaison de ses performances avec les contrôleurs de la littérature (sur la base du simulateur UVa) fera l'objet d'une publication prochaine (actuellement en cours de préparation).

Le TPC est un contrôleur simple et efficace, principalement construit sur la base des paramètres du TPM. Il s'appuie sur les concepts suivants :

1. Le rejet de l'effet des repas, au moyen d'un terme feed-forward, ce qui nécessite l'annonce au contrôleur du repas à venir. Ce point est commun à beaucoup de méthodes de commande envisagées pour le pilotage des pompes à insuline automatique. Bien évidemment, une analyse a été réalisée en simulation, pour estimer la "robustesse" du TPC en cas d'erreur ou d'oubli d'annonce.
2. L'adaptation de la consigne de glycémie : il a été montré que si la dynamique de l'effet de l'insuline est plus lente que celle du repas, il était impossible de maintenir une glycémie constante, notamment car la plupart des diabétiques injectent de l'insuline au moment du repas et pas à l'avance. Ici encore, l'adaptation de la valeur de consigne s'appuie principalement sur les paramètres du TPM et sur la connaissance et l'annonce des repas.

3. “L’insuline à bord” : Introduit par Ellingsen et al. [52], ce label est utilisé en référence à l’insuline encore active dans le sang au moment où le patient envisage de procéder à une injection supplémentaire. C’est un terme relativement difficile à estimer pour lequel plusieurs corrélations ont été construites. Ici, le TPM est utilisé pour construire un estimateur en boucle ouverte. La valeur ainsi estimée est prise en compte pour minorer la quantité d’insuline à injecter calculée par le contrôleur.
4. Structurellement, le TPC s’assimile à un simple régulateur proportionnel auquel on déduit l’effet dynamique de l’insuline à bord.

Les avantages du TPC par rapport aux régulateurs les plus simples (PID, ...) a été étudié au moyen du simulateur Uva Padova. Ainsi, par rapport à un PID, il ne nécessite aucun tuning manuel et que sa première injection est plus agressive, alors que les suivantes, du fait de l’estimation de l’insuline à bord sont plus modérées (“défensives”). Il semble donc plus à même de rejeter l’effet des repas non ou mal annoncés, car un PID est généralement réglé pour éviter les oscillations, et donc pour être moins réactif. Ses désavantages, notamment une plus grande sensibilité au bruit de mesure ont été aussi discutés, et des solutions ont été proposées pour y remédier.

Le TPC a aussi été comparé en simulation à d’autres contrôleurs de la littérature [128, 31, 37]. Les résultats de simulations montrent des résultats la plupart du temps comparables, parfois meilleurs, et plus rarement inférieurs à des contrôleurs pourtant souvent plus complexes (e.g. le MPC de [128]). Ces résultats sont cependant à prendre avec précautions, car la plupart de ces régulateurs exploitent leurs pleines potentialités dans des scénarios parfois difficiles à reproduire. Il reste que ces travaux, qui ont donné lieu à plusieurs projets de Master et, donc, à la thèse d’Alain Bock [10] montrent qu’un modèle, compatible avec les paramètres classiques de la prescription médicale, pouvait mener à des résultats équivalents, sinon meilleurs, que des modèles plus complexes, pour le fitting, la prédiction et, comme discuté dans cette section, pour le contrôle de la glycémie.

## Chapitre 5

# Conclusions et Perspectives

### 5.1 Conclusions

L'objectif de ce document est de résumer mes activités de recherche au cours des quinze dernières années. La recherche en génie des procédés chimiques suit quasi-systématiquement les trois étapes suivantes : la *modélisation* mathématique des procédés, la *simulation* des modèles développés et *l'expérimentation* durant laquelle les mesures disponibles sur le procédé sont typiquement utilisées pour améliorer le modèle. Un modèle n'est pas qu'un outil de simulation permettant de prédire le fonctionnement de systèmes industriels. C'est aussi un outil qui permet de valider ou d'invalidier la compréhension physico-chimique du procédé. Enfin, c'est un outil qui peut être utilisé pour contrôler et/ou optimiser les performances d'un procédé. C'est l'étape ultime de la recherche et du développement en génie des procédés : celles où au-delà d'utiliser les connaissances et la compréhension d'un système pour dimensionner et simuler le fonctionnement d'installations, l'ingénieur ou le chercheur cherche à s'assurer que le procédé est opéré comme il se doit et/ou de manière optimale.

La plupart des travaux de recherche que j'ai effectués s'inscrivent dans cette étape ultime, et j'ai pu participer à la fondation et au développement de deux méthodes d'optimisation basées sur les mesures. Un modèle n'étant jamais une représentation parfaite de la réalité, ces méthodes proposent d'utiliser les mesures disponibles sur le procédé pour en assurer la faisabilité et l'optimalité, malgré la présence d'incertitude. Comme on l'a vu, ces recherches ont souligné qu'un modèle, pour pouvoir être utilisé pour optimiser un procédé, devait être capable de prédire ses conditions nécessaires d'optimalité, qu'il soit capable ou non de prédire ses sorties mesurées avec précision. Ainsi, pour une des deux familles de méthodes sur lesquelles j'ai travaillé, il a été démontré qu'il pouvait être préférable de remplacer un modèle détaillé par une approximation convexe, puisque cela permet de bénéficier de propriétés utiles pour la quête d'optimalité.

En aucun cas ces résultats ne doivent être perçus comme un message prônant l'inutilité des modèles détaillés ou de l'amélioration des modèles sur la base des

mesures disponibles. Un modèle détaillé et précis reste le meilleur outil pour analyser un procédé. Cependant, mes activités de recherche m'ont convaincu qu'un modèle doit être utilisé conformément à ce pourquoi il a été développé. Un modèle entraîné à prédire des sorties peut être inefficace pour prédire des conditions nécessaires d'optimalité et vice-versa. Cependant, rien n'interdit de disposer des deux types de modèles, et dans de nombreux cas un bon modèle de prédiction peut s'acquitter des deux objectifs.

Le fruit de mes activités de recherche a été le développement et la validation de méthodes quand ce n'est malheureusement pas le cas. Comme on l'a vu, la plupart de ces contributions sont de nature méthodologique. C'est parfaitement justifié car si l'on considère que la connaissance (i.e le modèle) que l'on a d'un procédé n'est pas suffisante pour garantir que l'on puisse l'opérer de façon optimale, pour espérer pouvoir proposer une solution applicable, il est nécessaire de démontrer que l'on est capable d'atteindre les performances optimales du vrai procédé. Il convient donc de travailler au double niveau des conditions nécessaires d'optimalité (i) du modèle que l'on utilise et (ii) du procédé, et de déterminer les conditions pour lesquelles les méthodes proposées permettent de passer de la satisfaction de (i) à la satisfaction de (ii). Il en résulte deux familles de méthodes : *RTO via NCO-tracking* adaptée aux procédés (semi-)batchs et aux problèmes d'optimisation dynamique et *RTO via Modifier Adaptation*, adaptée aux procédés continus et aux problèmes d'optimisation statique ou en régime permanent. NCO-tracking a été volontairement moins discutée dans ce rapport puisque, pour ce qui concerne mes activités de recherche, elle a été principalement au cœur de mon travail de doctorat. Par contre ces sont ses limitations intrinsèques qui ont permis de poser un certain nombre de questions de recherche auxquelles RTO-MA ainsi que les Conditions Suffisantes de Faisabilité et d'Optimalité (SCFO) apportent des réponses.

Les travaux que j'ai récemment supervisés dans le domaine du diabète, s'ils s'inscrivent plutôt dans une démarche de modélisation pour la prédiction de sorties délivrent un message relativement similaire. Si l'objectif du modèle est la compréhension du système glyco-régulateur, alors le modèle développé dans le cadre de la thèse d'Alain Bock (TD1) est d'une utilité modérée – à l'image de beaucoup de modèles de la littérature. Ici les objectifs de ce modèle sont la prédiction de glycémie, le contrôle et l'optimisation. Comme dans le cas particulier du traitement de diabétiques, le médecin aura *toujours* le dernier mot, la propriété prioritaire que le modèle se doit d'avoir est d'être compatible avec des injonctions thérapeutiques – qui ont fait leurs preuves depuis la découverte de l'insuline – pour ne serait-ce qu'imaginer l'utiliser.

La validation de ces méthodes, la seule qui ait un sens véritable, réside dans leur application à des systèmes réels. J'ai pu travailler sur l'optimisation de réacteurs de copolymérisation durant ma thèse et leur appliquer *RTO via NCO-tracking*. Plus récemment, j'ai pu travailler au travers de différents projets (que j'ai initiés, conduits et (co-)supervisés) traitant de systèmes énergétiques, biotechnologiques et mécaniques. C'est le grand intérêt de l'optimisation et de la commande : de nature générique, elles s'appliquent de façon similaire à des systèmes très différents. L'application la plus originale qu'il m'ait été donné de



considérer est sans doute le travail sur l'allocation dynamique de prix de vente de services dans le domaine du "cloud-computing" [90]. Mais les applications sur les piles à combustible de type SOFC (cf. Chapitre 4) ou de type PEM en partenariat avec Swatchgroup (non présenté dans le document mais introduit en annexe en section C.1.6) sont de bons exemples de ce que *RTO via Modifier Adaptation* et les *SCFO* peuvent apporter pour l'optimisation des procédés chimiques continus, car une pile à combustible n'est au final rien de plus qu'un réacteur électrochimique. La problématique du réglage itératif de contrôleurs ou de la détermination de trajectoires optimales pour un procédé dynamique (ici illustrée par le réglage d'un contrôleur MPC pour un cristalliseur et par l'optimisation en temps réel de kites) sont aussi des applications concrètes qui soulignent l'applicabilité des outils et des méthodes développés durant ces quinze dernières années à des problèmes concrets, fréquemment rencontrés dans l'industrie chimique. Enfin le projet sur les kites, et ses premiers résultats concernant l'adaptation de la trajectoire à suivre le long d'un cycle, pour maximiser la puissance moyenne produite, illustre le développement d'une méthode générique, applicable aux procédés chimiques discontinus. Dès à présent, des études en simulation sont en cours sur un réacteur de Williams-Otto et sur un procédé de fermentation.

## 5.2 Perspectives

En l'espace de quelques années, RTO-MA est passé du statut de méthode prometteuse à méthode applicable. C'est très encourageant, et les différents résultats méthodologiques et appliqués illustrent tout le potentiel de l'approche. S'affranchir de l'impossibilité de vérifier l'adéquation du modèle par l'utilisation d'approximations convexes et proposer un cadre pour utiliser RTO-MA pendant le transitoire vers le régime permanent sont deux contributions qui, je l'espère, permettront d'installer RTO-MA comme une méthode de choix, à l'image des techniques de contrôle de gradient. Cependant il reste de nombreux points à éclaircir qui feront l'objet de un ou plusieurs projets de recherche méthodologique.

1. Remplacer le modèle par une approximation convexe (uniquement pour l'optimisation), permet d'assurer que l'on utilise un modèle adéquat, sans hypothèses sur la solution optimale. L'approximation convexe discutée dans ce document est simplissime et son avantage est d'être facile à construire sur la base de simulations. Cependant, une "mauvaise" approximation convexe peut conduire à une augmentation significative du nombre d'itérations. Il convient donc de faire des efforts significatifs dans cette direction, le minimum étant sans doute de comparer sur un nombre élevé d'exemples, l'influence du choix de la méthode d'approximation convexe sur la vitesse de convergence.
2. Réaliser les itérations de RTO-MA durant le transitoire, notamment avec une approximation convexe permet d'envisager d'utiliser RTO-MA comme un contrôleur. Cependant l'optimalité en régime permanent n'implique

pas la stabilité durant le transitoire. Il convient donc d'étudier la stabilité de la méthode. C'est un travail fondamental très complexe, puisque le calcul des entrées n'est pas explicite, comme dans le cas d'une loi de commande, mais résulte de la résolution d'un problème d'optimisation. Les observations montrent que si le système a un comportement dynamique particulier, comme par exemple un système exhibant des dynamiques internes instables, il est nécessaire de diminuer la fréquence de ré-optimisation ou d'augmenter le filtrage, jusqu'au point ultime – pour les systèmes aux comportements dynamiques les plus critiques – où le gain de temps est réduit à néant par rapport aux itérations classiques de régime stationnaire en régime stationnaire. Une façon optimiste d'interpréter ces observations serait de constater que cela implique que les performances sont au pire les mêmes que dans la formulation classique de RTO-MA. Ce n'est évidemment pas satisfaisant et étudier la stabilité pour des structures simples (par ex. dans le cas d'une fonction coût quadratique, avec des contraintes linéaires ou quadratiques, pour un système dynamique linéaire ou affine en le commande) doit être réalisable, et me semble nécessaire pour identifier les cas pour lesquels il est exclus/inutile d'utiliser RTO-MA en ligne.

3. La même remarque vaut pour le solver SCFO. Il est présentement appliqué à des piles SOFC en tenant compte du fait que la partie électrochimique est quasi-statique et que la dynamique thermique est lente. Il convient d'étudier si cette séparation d'échelle de temps est suffisante pour assurer la stabilité une pile à combustible. Les premières réalisations expérimentales semblent montrer que c'est le cas, mais il faut bien évidemment étayer cette observation et étudier le cas échéant sa généralisation à des classes de systèmes dynamiques, par ex., stables en boucle ouverte.
4. Appliquer RTO-MA en ligne, pour optimiser la performance en régime établi nécessite d'être en mesure d'estimer en ligne les modificateurs, définis a priori en régime permanent. Dans ce rapport, j'ai présenté l'estimateur que nous avons proposé, un estimateur en boucle ouverte, simple et consistant. Ce dernier point est son intérêt principal : il n'est pas besoin d'étudier a priori les propriétés à convergence de l'estimateur, puisque l'on peut immédiatement affirmer que les modificateurs d'ordre 0 estimés tendent vers les modificateurs théoriques lorsque le système approche le régime permanent. Il en va presque de même pour les estimateurs d'ordre 1, et l'on peut affirmer aisément que les valeurs estimées en ligne tendent vers les valeurs qui auraient été obtenues si l'estimation avait été réalisée de régime permanent en régime permanent. Ce sont des résultats intéressants, mais loins d'être suffisants, et il faut bien évidemment améliorer l'estimation des modificateurs, en étudiant par exemple l'applicabilité du filtre de Kalman.

Cependant, les résultats méthodologiques et appliqués obtenus durant ces quinze dernières années et les promesses qu'elles offrent ouvrent la voie au développement d'activités de recherche dans des domaines plus larges que RTO-

MA et les SCFO. Ainsi, parmi les pistes de recherche que j'imagine initier et développer au niveau méthodologique :

1. *Optimisation Multicritère en temps réel* : Dans beaucoup de cas d'étude, notamment industriels, le problème d'optimisation envisagé ne comporte pas un seul objectif. Plusieurs fonctions coûts sont envisageables, et l'approche classique consiste à construire une combinaison convexe des différentes fonctions objectif et, en variant le poids attribué à chacune des fonctions objectif, de tracer le *front de Pareto*. Le front de Pareto permet de définir des ensembles de conditions opératoires optimales sans relation de domination entre elles. Typiquement, une procédure d'aide à la décision permet ensuite de décider lesquelles seront retenues. Le problème, déjà difficile, est encore plus compliqué si l'on considère la présence d'incertitude. J'imagine une recherche en deux axes dans ce domaine. Tout d'abord, étudier l'intérêt de l'analyse variationnelle, par exemple des conditions nécessaires d'optimalité, pour l'aide à la décision. Pourquoi ne pas considérer le point du front de Pareto le moins sensible à l'incertitude comme candidat ? Le deuxième axe pourrait consister en une extension de RTO au cas multiobjectif : pour une méthode d'aide à la décision donnée, un point du front de Pareto peut-être sélectionné. En présence d'incertitude, d'erreurs de modélisation ou de perturbations, le point déterminé initialement peut ne plus être "le meilleur". Peut-on utiliser les techniques de RTO pour apporter la correction nécessaire, en temps réel, à l'image de ce qui peut être réalisé dans le cas monoobjectif ?
2. *Optimisation en temps réel distribuée* : Les procédés sont de plus en plus interconnectés et de natures diverses. Ainsi, il est clair que la réponse, par exemple, à la crise énergétique ne repose pas sur une seule technologie et sur une seule source, mais plutôt sur la combinaison de différentes technologies. En conséquence, non seulement chacune des unités doit être optimisée *individuellement* au niveau du design comme au niveau opératoire, mais *l'opération combinée* doit également être optimale. C'est d'autant plus vrai que l'incertitude peut affecter indépendamment chacune des unités. Où convient-il de rejeter ou de limiter l'effet de l'incertitude et des perturbations ? Faut-il agir de manière centralisée, décentralisée ? Ce sont des questions de recherche pour lesquelles un certain nombre de chercheurs sont actifs dans le domaine des "smart grids" ou de la gestion des transports. Mais formuler et résoudre de tels problèmes multicouches est un champ de recherche ouvert pour le process systems engineering dans lequel, idéalement, des éléments d'optimisation en temps réel, et/ou multicritère et/ou globale pourront être intégrés.
3. *L'optimisation en temps réel comme critère de design ?* : Jusqu'à présent, le design des procédés est considéré comme un prérequis au développement de méthodes de contrôle et d'optimisation. J'aimerais étudier la possibilité d'intégrer le potentiel d'un système contrôlé et optimisé en ligne, notamment sa capacité à rejeter l'effet de l'incertitude et des perturbations, comme un paramètre de design supplémentaire. Par exemple, le rempla-

cement envisagé en Suisse de grandes stations de traitement des eaux centralisées par des unités plus petites, décentralisées, risque de rendre les nouvelles stations plus sensibles aux variations de charge que les anciennes. La capacité des outils de contrôle à compenser ces variations doit pouvoir être prise en compte lors du dimensionnement de telles unités, pour éviter de les sur-dimensionner.

Au niveau applicatif, si j'espère continuer à travailler sur les piles à combustible, 4 domaines présentent beaucoup de potentiel de développement et d'application des outils du génie des procédés en générale et de l'optimisation en temps réel en particulier : (i) la chimie industrielle, (ii) la chimie verte, (iii) la production d'énergie, et (iv) les procédés biotechnologiques environnementaux, avec emphase sur le traitement des eaux et sur la production de biogaz, qui sont deux enjeux majeurs. Ce sont des secteurs concurrentiels, émergents, et/ou (déjà ou bientôt) en crise. Pour chacune de ces thématiques, les outils de modélisation, de dimensionnement, de commande et d'optimisation sont autant de clés qui peuvent permettre aux méthodes les plus innovantes de devenir des solutions économiquement viables pour la production et la gestion de l'énergie, la production d'eau et la production éco-responsable de composés chimiques.

Enfin, l'intensification des procédés est aussi un champ relativement ouvert, en ce sens que durant les quinze dernières années il a surtout donné lieu à de grandes innovations technologiques dans le design et l'intégration des procédés, la distillation réactive en étant sans doute le meilleur exemple. Cependant, plus un procédé est intensifié dans sa conception, plus sa fenêtre opératoire et sa controllabilité peuvent être réduites, et plus sa sensibilité à l'incertitude peut croître. Développer des méthodes, notamment d'optimisation des procédés intensifs, est une direction de recherche pleine d'avenir, à mon sens.

## Annexe A

# Curriculum vitae

Grégory FRANCOIS

Né le 8 Novembre 1974 à TOULON Marié, sans enfant

Adresses personnelle :

Rue de Bassenges 27,  
CH-1024 Ecublens, Suisse.

Adresses professionnelles :

Domaine Ingénierie et Architecture,  
Haute École Spécialisée de Suisse Occidentale (HES-SO),  
Rue de la Jeunesse, 1, CH-2800 Delémont, Suisse.

Laboratoire d'Automatique,  
École Polytechnique Fédérale de Lausanne,  
EPFL-STI-LA, Station 9,  
CH-1015 Lausanne, Suisse.

Téléphone (mobile) +41 (0)78 731 57 83  
e-mail : gregory.francois@hes-so.ch, gregory.francois@epfl.ch

Parcours Professionnel :

Depuis le 1er Juin 2014	Adjoint Scientifique, Doyen Adjoint, Faculty of Engineering and Architecture, University of Applied Sciences and Arts of Western Switzerland (HES-SO) (Domaine Ingénierie et Architecture, Haute École Spécialisée de Suisse Occidentale),
Depuis le 1er Nov 2008	Chercheur Invité, Hôte Académique, Laboratoire d'Automatique, École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL),
1er Nov 2008 - 31 Oct 2013	Senior Researcher & Lecturer, Laboratoire d'Automatique, École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL),
Depuis 2006	Maître de Conférences à l'Université de Perpignan Via Domitia (UPVD), Recherche à l'UPVD et à l'INRA de Narbonne, Enseignement à l'IUT de Perpignan, site de Narbonne (Génie Chimique), <i>en disponibilité pour regroupement familial depuis novembre 2008</i> ,
2005-2006	Chercheur Postdoctoral, Groupe d'Implantation Industrielle, Laboratoire de Technologie des Composites et Polymères, EPFL,
2005	Enseignant d'Algèbre, École Techniques des Métiers (ETML), Lausanne,
1999-2004	Assistant d'Enseignement et de Recherche, Laboratoire d'Automatique, EPFL,
1998-1999	Service National Scientifique du Contingent, Laboratoire des Sciences du Génie Chimique, CNRS Nancy, France.

Formation et Diplômes :

- |             |  |
|-------------|--|
| 1999-2004   | Doctorat ès Sciences EPFL, "Measurement-based run-to-run optimization of batch processes : application to industrial acrylamide copolymerization", Dirs. : Prof. Dominique Bonvin & Dr. Bala Srinivasan, acceptée sans réserve (meilleure mention possible en Suisse), |
| 1998        | DEA en Génie des Procédés, Institut National Polytechnique de Lorraine (INPL), Dir. : Prof. A. Latifi, mention TB,   |
| 1998        | Diplôme d'Ingénieur, École Nationale Supérieure des Industries Chimiques (ENSIC), Nancy,   |
| 1992 - 1995 | Classes Préparatoires (Sup. & Spé P'), Lycée Dumont d'Urville, Toulon.   |

Divers :

AIChE (American Institution of Chemical Engineers) : Membre  
Expert pour l'Agence Nationale de la Recherche (ANR)

## Annexe B

# Activités d’enseignement – Activités Administratives

Ayant travaillé dans plusieurs universités depuis 1999, la nature et le volume des enseignements dont j’ai eu la charge a significativement varié d’une année sur l’autre. C’est pourquoi mes activités d’enseignement sont présentées chronologiquement, avant d’être résumées, pour l’essentiel sous la forme d’un tableau.

### B.1 1999-2004 : Assistanat d’enseignement

Entre 1999 et 2004, à l’EPFL, j’avais à assumer des tâches d’enseignement à hauteur de 25 % et des activités de recherche à hauteur de 75 % de mon temps de travail. J’ai ainsi eu la chance de développer significativement mon expérience et de profiter des interactions avec les étudiants. Mes tâches englobaient principalement : (i) de l’assistanat pendant les séances de travaux pratiques et dirigés et (ii) la proposition et l’encadrement des sujets de projets étudiants de semestre et de master (le cas échéant avec un sénior de recherche et/ou un Professeur de l’EPFL).

En plus de ces tâches “classiques” pour un assistant d’enseignement et de recherche, candidat au doctorat, j’ai été officiellement nommé chargé de cours en 2003, en remplacement du Professeur Bonvin lors de son séjour sabbatique. Pour cela, comme il n’est pas a priori prévu dans les statuts qu’un doctorant puisse être chargé de cours (magistral, avec la responsabilité de l’examen et donc inscription au plan d’études), j’ai eu à passer une audition et présenter un cours devant une commission, chargée de m’octroyer (ou non) le grade de chargé de cours.



## B.2 2005-2006 : Enseignant d’algèbre/Chercheur postdoctoral

En 2005, j’ai travaillé de fin janvier à fin juillet comme enseignant d’algèbre à l’Ecole Technique des Métiers de Lausanne, avec notamment une charge d’enseignement à l’Ecole Technique Supérieure (équivalent suisse d’un BTS). À la fin de l’année 2005, j’ai rejoint le groupe d’implantation industrielle du Laboratoire de Technologie des Composites et Polymères de l’EPFL. Travaillant dans un spin-off du laboratoire sur des projets industriels, j’y avais relativement peu de tâches d’enseignement, si ce n’est quelques TP de matériaux, non listés dans ce document.

## B.3 2006-2008 : Maître de Conférences

Entre septembre 2006 et novembre 2008, date de ma mise en disponibilité pour regroupement familial, j’ai travaillé comme Maître de Conférences à l’Université de Perpignan. Nous démarrions le Département de Génie Chimique de l’IUT de Perpignan (site de Narbonne), et avions à effectuer de nombreuses heures complémentaires. J’avais donc à charge 280 heures eq. TD par an d’enseignement de 7 matières :

1. Techniques Séparatives et Environnement (IUT 2A)
2. Génie des Séparations (IUT 2A)
3. Sécurité Industrielle (IUT 2A)
4. Commande de Procédés, (IUT 2A)
5. Etude Technico-économique de projets (IUT 2A)
6. Simulation (IUT 2A)
7. Mathématiques (algèbre et analyse niveau 2), (IUT 1A)

Ces cours étaient à démarrer “de zéro” : contenu des cours, TDs et TPs, avec la contrainte supplémentaire que les locaux n’étaient pas encore livrés. J’ai ainsi créé des TPs (par ex. manipulation d’extincteurs avec les pompiers de Narbonne, sur le site de la COMURHEX, filtration tangentielle au Laboratoire de Biotechnologie Environnementale de l’INRA de Narbonne, ...), tout en créant les séances d’exercices et les cours magistraux, et, on le verra plus tard, en assumant la direction des études de deuxième année. Enfin, en 2008, ayant sollicité et obtenu une mise en disponibilité pour regroupement familial, j’ai tenu à effectuer mon service du semestre entre septembre et octobre, pour que mes collègues disposent d’un semestre entier sans avoir à assumer mes enseignements.

## B.4 depuis 2008

Depuis 2008 et mon retour à l’EPFL, j’enseigne à l’Ecole Doctorale (en anglais) le cours de Commande Optimale (cours à 4 crédits), à des étudiants inscrits à différents programmes doctoraux (doctorants en automatique, robotique,

Période	Section	Nature	Niveau	Volume total
1999-2004	Génie Mécanique	TP	M1	40 h
-	Microtechnique	TP	M1	60 h
-	Génie Chimique	TP	M1	4 h
-	Génie Chimique	TD	M1	36 h
-	Génie Chimique	CM	M1	14 h
2005	Algèbre	CM+TD	BT/BTS	196 h
2006-2008	Génie Chimique	CM+TD+TP	IUT 1A/2A	660 h
2008-	Ecole doctorale	CM+TD	Ecole doctorale	360 h

TABLE B.1 – Activités d’Enseignement

génie chimique, énergétique, biotechnologie, ingénierie financière, ...). C’est un cours qui a du succès, avec un nombre d’étudiants bien supérieur à la moyenne des cours doctoraux.

À mon arrivée, j’ai changé la procédure d’évaluation du cours en supprimant l’examen écrit intermédiaire, considérant que (i) la réalisation d’un projet, la rédaction d’un rapport et la soutenance orale devant un jury avec expert externe étaient plus appropriées pour l’évaluation de doctorants, d’autant que certains sont en dernière ou avant-dernière année et que (ii) l’examen intermédiaire ne couvrait pas assez le cours dans sa globalité.

Le tableau B.1 résume mes activités d’enseignement pour les périodes susmentionnées. A noter que les encadrements de projets de Master, considérés comme faisant partie des activités d’enseignement comme de recherche à l’EPFL seront listés dans la section suivante pour les projets de Master I et en section C.3.1 pour les projets de Master II de fin d’études.

## B.5 Encadrements d’Étudiants

J’ai encadré, lorsque j’étais Maître de Conférences, plusieurs étudiants durant leur stage en entreprise. À l’EPFL, j’ai encadré et participé au jury de nombreux projets de Master I (projets de semestre), sans compter les Masters II (recherche) listés dans la section C.3.1. La liste suivante présente les encadrements de projets de quatrième année (Master I). Les projets dont les intitulés sont mentionnés deux fois (ex. PE1 et PE3) correspondent à des projets réalisés sur un semestre et poursuivis le semestre suivant. Ce sont bien donc des projets indépendants, qui ont donné lieu à chaque semestre à une présentation intermédiaire, un rapport final, une présentation finale, et une note d’examen. L’EPFL considère depuis peu que l’encadrement d’un projet M1 correspond à 2.25h d’enseignement par semaine.

PE1 I. ALBERDI BALENTZIAGA, “Iterative Design of Experiment”, printemps 2013.

PE2 R. WALDIS, “Modeling and Control of an Experimental Kite System”, 2013.

- PE3 I. ALBERDI BALENTZIAGA I., “Iterative Design of Experiments”, automne 2012.
- PE4 E.MARTINOLO & P. BERTUS, “Modeling and Control of an Experimental Kite System”, 2012 (double projet).
- PE5 F. FRAIRE, “Comparison of Tuning Schemes for Model-Predictive-Control”, 2011.
- PE6 F. XAVIER., “Stochastic Modeling of Diabetics”, 2011.
- PE7 R. HENRIQUES., “Optimal Control for the Treatment of Diabetes during Physical Activity”, 2011.
- PE8 F. FRAIRE, “Adaptive Tuning Schemes for Run-to-Run Model-Predictive Control”, 2011.
- PE9 S. GRANGES, “Modeling and Optimization of Energy Distribution in Urban Waste Incineration”, automne 2010.
- PE10 S. GRANGES, “Modeling and Optimization of Energy Distribution in Urban Waste Incineration”, printemps 2010.
- PE11 F. HUGUENIN, “Optimal Control for the Treatment of Diabetes during Physical Activity”, 2010.
- PE12 B. SCHAEFER, “Perfusion rénale”, 2004.
- PE13 Y. FASEL, “Commande optimale pour la conduite au fil de l’eau d’une cascade de trois usines hydroélectriques”, 2004
- PE14 Y. MARCLAY, “Commande d’une turbine Pelton”, printemps 2000.
- PE15 Y. MARCLAY, “Commande d’une turbine Pelton”, automne 1999.

J’ai servi aussi régulièrement comme expert externe aux examens à l’EPFL et comme observateur pour les examens oraux.

## B.6 Activités administratives

Les principales activités administratives que j’ai assumées sont résumées ci-dessous

1. À l’IUT de Génie Chimique, j’occupais les fonctions de directeur des études de deuxième année. Comme nous démarrions le département, les tâches étaient nombreuses et lourdes. Ainsi j’avais : (i) à gérer l’emploi du temps de deuxième année, (ii) à trouver, à proposer l’engagement et assurer le suivi des notes d’examens des intervenants extérieurs, et (iii) à gérer les résultats de deuxième année et l’attribution des diplômes (DUT). Comme nous n’avions pas encore les locaux, il fallait aussi gérer les réservations de salles (IUT de Carrières Juridiques, Laboratoire de Biotechnologie Environnementale de l’INRA Narbonne). Sans locaux, nous ne disposions pas non plus d’une infrastructure très développée, et beaucoup de ces tâches s’effectuaient manuellement.

2. Depuis 2008, je suis membre du “Seniors Group” du laboratoire (conseil de direction), où nous prenons les décisions telles que l’organisation des locaux, l’engagement du personnel administratif et technique, des doctorants et des post-doctorants (tâches pour lesquelles tous les membres du conseil de direction visent les dossiers, participent au processus d’interview, et, le cas échéant, votent pour ou contre le recrutement), ou encore l’achat de matériel.
3. Entre 2008 et 2012, à l’EPFL, j’ai organisé les séminaires du Laboratoire. Ainsi j’ai organisé pendant 4 ans entre 6 et 8 séminaires par semestre, invitant des chercheurs principalement européens - pour des raisons de budget, qui même s’il était conséquent (environ 10’000 CHF par semestre) ne permettait pas de financer des voyages hors zone-Europe. Ponctuellement, j’ai aussi invité des intervenants nord-américains, profitant de leurs éventuels voyages en Europe.
4. En 2012, j’ai organisé les “Research Days” du laboratoire, deux jours de mise au vert et de séminaires internes, avec un budget de 15’000.- CHF.
5. Depuis le 1er Juin 2014, j’occupe les fonctions de doyen adjoint de la Haute École Spécialisé de Suisse Occidentale (HES-SO), c’est à dire la structure rectorale – l’Université des Sciences Appliquées de Suisse Occidentale – pour la Faculté d’Ingénierie et d’Architecture. Cette Université comporte 6 facultés : design et arts visuels, économie et services, ingénierie et architecture, musique et arts de la scène, santé et travail social. Cette structure chapeaute les activités de 28 hautes écoles, réparties dans 7 cantons francophones et forme chaque année plus de 18’000 étudiants. Il faut noter que les 28 hautes écoles cantonales sont bien plus anciennes que la structure rectorale qui les chapeaute à présent. Il y a donc un grand besoin d’harmoniser les enseignements, les protocoles de recrutement et de promotion, mais aussi les pratiques de R&D, pour faciliter notamment la mobilité des étudiants et des chercheurs.

Je travaille pour l’instant sur trois ”gros dossiers” : (i) le programme de Master en Architecture commun trois hautes écoles (Genève, Fribourg et Berne), l’accréditation de la filière de Bachelor en Ingénierie des Technologies de l’Information et (iii) la création et le pilotage d’un comité d’enseignement pour l’harmonisation des pratiques d’enseignement entre les différentes écoles.

6. J’ai travaillé à l’organisation de la 13ème conférence internationale sur les technologies énergétiques durables, qui aura lieu fin août à Genève, en tant que membre du comité local d’organisation, membre de l’IPC et “session chair”. J’y ai aussi soumis un article de conférence, qui y a été accepté (CA1). La conférence a été un succès avec 200 participants (la bonne moyenne de cette conférence), un équilibre financier atteint, malgré des conditions initiales très défavorables et un discours remarqué d’un conseiller d’état ( ministre) genevois.

## Annexe C

# Activités de valorisation et transfert – Financements Obtenus

On trouvera ici une liste des activités les plus marquantes en liaison avec des partenaires industriels et académiques, qu'il s'agisse de contrats ou de simples collaborations, ainsi que les différents financements obtenus.

### C.1 Projets avec collaboration / financement industriel

#### C.1.1 Projets étudiants

Les projets étudiants de Master I : PE7, PE8, PE9, PE10, PE11 et PE12 (cf. section B.5) ont fait l'objet d'une collaboration industrielle avec entre autres partenaires, EDF, l'Hôpital Universitaire de Genève, Tridel (incinération de déchets urbains), une multinationale pharmaceutique (cf. section C.1.9), etc.. De la même façon, les projets de Masters II : MR1, MR2, MR3, MR4, MR6 et MR7 (cf. section C.3.1) ont fait l'objet de collaborations industrielles.

Deux de ces projets, i.e. MR1 et MR2, sont brièvement présentés dans cette section. MR1 est effectué en collaboration avec le "Production Technology Center" de Nestlé, Orbe, Suisse. Il s'agit de développer des modèles dynamiques et des contrôleurs avancés pour améliorer la commande des sécheurs industriels pour la production de café instantané. C'est un projet de Master réalisé au laboratoire, pour lequel M. S. Manzini se rend régulièrement à Orbe.

Le projet MR2 est effectué sur le site de production de Huntsman à Monthey, Suisse. Il s'agit de développer des modèles dynamiques et des contrôleurs avancés pour améliorer la commande en température réacteurs semi-batch industriels. À l'opposé de MR1, MR2 est réalisé sur site (à Monthey, Valais), et l'étudiant

vient régulièrement au laboratoire.

### C.1.2 Projets “United States Council for Automotive Research” et “Vinnova Consortium”

Il s’agit de deux projets industriels majeurs *confidentiels*, financés directement par les deux organismes mentionnés en titre, comportant des fabricants d’automobiles et de pièces en composites. J’ai participé à la réalisation de ces projets en 2005-2006, durant mon post-doc. Mes tâches consistaient à modéliser, à analyser la sensibilité et à optimiser le coût de fabrication en composites de pièces pour l’industrie automobile, sur la base de données techniques et financières réelles.

### C.1.3 Projet “Aqua+Tech”

Il s’agit de l’application consécutive à mes travaux de doctorat. J’ai eu la chance de pouvoir appliquer les méthodes d’optimisation développées durant ma thèse dans l’industrie, ce qui a permis d’augmenter de 20% la productivité de réacteurs copolymérisation en émulsion inverse d’une tonne. Dix ans plus tard, la société ([www.aquaplustech.ch](http://www.aquaplustech.ch)) utilise toujours ces méthodes et les a étendues à d’autres réactions et réacteurs.

### C.1.4 Projet “Opti’Enr”

Il s’agit de la thèse de doctorat de Julien Eynard (TD3) que j’ai co-encadrée en 2007 et 2008. Il s’agissait de modéliser et d’optimiser la chaufferie collective de La Rochelle Cofely - GDF Suez, comportant une chaudière à bois, une chaudière gaz, une centrale de cogénération et des panneaux solaires, pour le chauffage de 2700 logements, et de favoriser l’utilisation des sources renouvelables. Le travail a suivi les étapes de (i) modélisation, (ii) d’identification, (iii) de développement d’un modèle de stockage, et (iv) de développement d’un contrôleur de type MPC. Le projet a été mené à terme, et Julien Eynard (actuellement MCF) a obtenu sa thèse en 2010. Nous avons aussi travaillé sur l’optimisation de l’utilisation des renouvelables dans les bâtiments multi-sources, avant d’adapter ces approches pour la commande optimale du site de La Rochelle.

### C.1.5 Projet “SOFC”

Ce projet, en cours, couvre la partie applicative de la recherche de Gene Bunin que j’ai co-encadré entre 2009 et décembre 2013. Au moyen d’un financement externe (public-privé : Swisselectric / Office Fédéral de l’énergie) nous avons étudié l’application des méthodes d’optimisation développées par Gene Bunin dans le cadre de son travail de recherche pour les piles à combustible SOFC de la société SOFC Power à Yverdon les Bains (CH) et en Italie. Les premiers résultats expérimentaux, publiés dans le journal Energy, ont montré qu’il est possible d’optimiser en temps réel le rendement de la pile, malgré des

changements aléatoires de charge, et de respecter les contraintes notamment sur le potentiel des cellules de la pile. Nous travaillons à présent sur l'application de ces méthodes à des champs de piles industrielles.

### C.1.6 Projet “Belenos”

Dans ce projet, en partenariat avec Belenos, holding du SwatchGroup, nous étudions l'applicabilité des méthodes d'optimisation développées au laboratoire aux piles à combustible de type PEM. L'objectif du projet est la commercialisation d'ici moins de 5 ans de véhicules équipées de piles à combustible, et d'informatique embarquée, incluant les méthodes que nous aurons proposées, testées et validées sur les prototypes. Je suis porteur de ce projet pour le laboratoire qui implique aussi, notamment un post-doc et un autre doctorant. Un stagiaire de l'Université de Dartmouth (USA) a effectué un stage de dix semaines sur le projet et une étudiante du département de chimie/génie chimique entame son projet de Master sur le sujet. Pour l'instant nous en sommes à l'étape de modélisation de la pile, mais un prototype du véhicule est d'ores et déjà homologué et a parcouru plus de 3000 kms sur les routes suisses. À moyen terme il s'agira d'optimiser le fonctionnement d'une pile de 10kW pour la charge d'une batterie électrique et de l'optimisation du fonctionnement d'une pile de 40kW en cours de développement, susceptible d'être la source de puissance principale du véhicule, illustré par la photo C.1



FIGURE C.1 – Le prototype de véhicule à pile PEM de Bélénos.

### C.1.7 Projet “DACH”

Ce projet couvre la thèse de Sean Costello, que je co-encadre depuis 2009 (TD2). Il s'agit, succinctement, d'étendre l'applicabilité d'une des dernières méthodes que nous avons développées (à l'origine pour l'optimisation en régime permanent) pour les problèmes d'optimisation dynamique. Ce projet, financé pour notre part par le Fonds National de la Recherche Scientifique Suisse,

est réalisé en collaboration avec 5 Universités Allemandes (Aachen - Pr. W. Marquardt-, Magdeburg - Pr. R. Findeisen -, Stuttgart, - Pr. F. Allgower -, Dortmund - Pr. S. Engell -, et Heidelberg - Pr. H. Bock).

### C.1.8 Projet “SwissKitePower”

Ce projet correspond à la partie applicative de la thèse de Sean Costello (TD2). Un voile de type “kite-surf” (cerf-volant) peut être utilisée pour produire de l’énergie si, manœuvrée à haute altitude (là où le vent est fort et constant), elle est fixée à un câble, lui-même relié à une génératrice. Lorsque le câble se déroule sous l’effet du vent et de la trainée, de la puissance électrique est produite dont une partie seulement est utilisée pour ré-enrouler le câble et ramener la voile. Nous travaillons à la détermination des trajectoires optimales cycliques que doit suivre la voile, et à leur correction en temps réel, pour maximiser la production nette de puissance. Ce projet donne lieu à des projets étudiants, avec comme objectifs la construction, l’instrumentation et la commande d’un banc d’essai pour valider les résultats théoriques et méthodologiques de la thèse de Sean Costello (Projet “DACH”), mais aussi pour des futurs TP d’automatique. Nous disposons déjà d’un “mini-kite” manœuvrable au joystick et travaillons actuellement au développement des premiers algorithmes de commande automatique. Ce projet est réalisé au sein d’un consortium regroupant l’EMPA, l’ETHZ, l’École d’Ingénieurs du Nord-Ouest de la Suisse, Alstom et l’EPFL (<http://www.swisskitepower.ch>).

### C.1.9 Projet “Diabète”

Ce projet couvre la thèse d’Alain Bock, que je co-encadre depuis 2009 (TD1). Il s’agit de développer des modèles et des méthodes d’optimisation pour l’injection automatique d’insuline au moyen de pompes automatisées, à des patients diabétiques. Ce projet confidentiel, est financé par une multinationale pharmaceutique. Le processus de publication est par ailleurs passablement ralenti, car à chaque communication le partenaire industriel étudie l’éventualité du dépôt d’un brevet US avant la soumission de l’article correspondant. Un article journal a été soumis et un autre, sur l’utilisation d’approches stochastiques va être soumis et un troisième non listé est en cours de préparatuib.

### C.1.10 Projet “Cloud”

Ce projet, un peu particulier est le fruit d’une collaboration, sur mon temps de recherche personnel, avec une chercheuse post-doctorale de l’EPFL du Laboratoire des Systèmes et Applications de Traitement de Données Massives. À l’issue d’une des séances de mon cours doctoral qu’elle suivait, nous avons décidé de d’étudier l’applicabilité des principes de l’optimisation et de la commande prédictive au problème d’allocation dynamique de prix et de ressources pour la distribution, via le “cloud”, de produits commerciaux, pour maximiser les



profits et satisfaire la demande prédite. C'est une des toutes premières utilisations des techniques du Process Systems Engineering dans ce domaine, et notre collaboration s'est conclue par la publication d'un article dans un des meilleurs journaux du domaine.

## C.2 Financements obtenus

J'ai récemment obtenu des financements externes pour 4 projets :

1. CTI : "Development of Fuel Cells Stacks for Automotive Applications (*Belenos*)" ; 18 mois – 180'000.-CHF.
2. Swiss National Science Foundation : "On Using Measurements to Adapt the Cost and Constraints in Optimization Problems (*DACH*)" ; 36 mois – 180'000.-CHF.
3. Direct Industrial Funding (Roche) : "Models and Model-based Tools to Improve the Treatment of Diabetes (*Diabète*)" ; 12 mois + 24 mois – montant confidentiel.
4. SER (Swisslectric Research) + BfE (OFEN) - projet "Solid Oxide Fuel Cells-CH-ASE(*SOFC*)" ; 42 mois – 240'000.-CHF.

## C.3 Encadrement

### C.3.1 Diplômes d'Études Approfondies et Masters (9+1)

- MR1 S. MANZINI, "Control of a spray drying process", EPFL – Nestlé, 2013
- MR2 F. FRAIRE TIRADO, "Temperature control of an industrial semi-batch reactor", EPFL – Huntsman, 2013
- MR3 M.O. TORRALBA, "Efficiency Modeling of an Urban Waste Incineration Plant", EPFL-Tridel, 2012
- MR4 J. LU, "Optimal control of blood glucose concentrations under uncertainty for patients with type 1 diabetes", EPFL, 2012
- MR5 R. VALLOTTON, "Optimisation d'installations de chauffage combinées", EPFL, 2010
- MR6 S. MARTINEZ, "Population-based approach and Stochastic modeling of Diabetics", EPFL, 2010
- MR7 J. EYNARD, "Modeling, dynamic optimization and control of a anaerobic digester", UPVD, 2007
- MR8 M. MADÉRI, "Optimisation dynamique d'une réaction de copolymérisation en émulsion", EPFL, 2002
- MR9 L. MEYER, "Optimiseurs pour la commande prédictive", EPFL, 2002

Un autre projet de Master a commencé début octobre :

PdM1 H. RUDAZ, “Modeling and real-time optimization for a PEM fuel cell stack for automotive applications”, EPFL–Bélénos, 2013

L’EPFL considère que l’encadrement d’un projet M2 correspond à trois heures d’enseignement par semaine.

### **C.3.2 Thèses (3)**

TD1 A. BOCK, “Models and Model-based Tools to Improve the Treatment of Diabetes”, EPFL, en cours, co-encadrée avec D. Gillet, soutenance le 18-12-2013.

TD2 S. COSTELLO, “Two-Layered Dynamic Real-Time Optimization via Modifier Adaptation”, EPFL, en cours, co-encadrée avec D. Bonvin, soutenance mi-2014.

TD3 J. EYNARD, “Optimal Energy Management in a Multi-Energy Process Applied to Building Heating”, UPVD, co-encadrée avec M. Polit, soutenue en septembre 2010.

Notons que j’ai co-encadré également les activités de recherche de Gene Bunin depuis 2009 (et ce jusqu’à la fin 2013), assistant d’enseignement et de recherche au LA-EPFL. Malgré sa production scientifique remarquable, il n’a pas désiré défendre un doctorat, qu’il aurait obtenu sans aucune difficulté.

## **C.4 Participation à des jurys**

### **C.4.1 Jurys de thèse**

JT1 S. AYOUB, “Simulation et Optimisation des Procédés d’Adsorption Modulée en Pression - Formulation et Résolution à l’Aide de l’Optimisation Dynamique Hybride”, Thèse de l’Institut National Polytechnique de Lorraine, Nancy, soutenue le 26 mars 2010

JT2 B. BENYAHIA, “Modélisation, expérimentation et optimisation multicritère d’un procédé de copolymérisation en émulsion en présence d’un agent de transfert de chaîne”, Thèse de l’Institut National Polytechnique de Lorraine, Nancy, soutenue le 4 décembre 2009

### **C.4.2 Jurys de DEA/master**

JM1 S. MANZINI, “Control of a spray drying process”, EPFL – Nestlé, août 2013

JM2 F. FRAIRE TIRADO, “Temperature control of an industrial semi-batch reactor”, EPFL – Huntsman, septembre 2013

JM3 M.O. TORRALBA, “Efficiency Modeling of an Urban Waste Incineration Plant”, EPFL-Tridel, 2012

JM4 J. LU, “Optimal control of blood glucose concentrations under uncertainty for patients with type 1 diabetes”, EPFL, 2012

- JM5 R. VALLOTTON, “Optimisation d’installations de chauffage combinées”, EPFL, 2010
- JM6 S. MARTINEZ, “Population-based approach and Stochastic modeling of Diabetics”, EPFL, 2010
- JM7 J. EYNARD, “Modeling, dynamic optimization and control of a anaerobic digester”, UPVD, 2007
- JM8 M. MADÉRI, “Optimisation dynamique d’une réaction de copolymérisation en émulsion”, EPFL, 2002
- JM9 L. MEYER, “Optimiseurs pour la commande prédictive”, EPFL, 2002

## C.5 Collaborations universitaires internationales principales

Durant ma thèse j’ai participé aux collaborations suivantes

- Projet Européen FP V (thèse de doctorat) - “CPERI Thessalonique”, “University of Newcastle”, “DTU Copenhagen”, ... .
- Collaboration d’un mois avec FEUP Porto (thèse de doctorat), sur l’optimisation globale stochastique.

Plus récemment, je suis impliqué dans les collaborations :

- Projet “DACH” avec 5 Universités Allemandes.
- Collaborations régulières avec l’Ecole Polytechnique de Montréal (Prof Srinivasan).
- Collaboration avec l’“Universidade de Coimbra” (Pr. L.N. Vicente) sur les méthodes d’optimisation “gradient-free”.

## C.6 Activités de revue

Durant les 5 dernières années j’ai examiné plus d’une soixantaine d’articles de journaux et de conférences (je ne garde pas trace de ces activités au delà de 5 ans).

Je suis notamment relecteur régulier pour les journaux suivants : “Journal of Process Control”, “Industrial & Engineering Chemistry Research” - 12 articles pour ce seul journal sur les 5 dernières années, “Computers & Chemical Engineering”, “Brazilian Journal of Chemical Engineering”, “Energy & Buildings”, “Chemical Engineering Technology”, “Journal Européen des Systèmes automatisés”, ...

Je suis aussi relecteur régulier pour les conférences suivantes : “American Control Conference”, “European Control Conference”, “International Federation of Automatic Control - World Congress”, “ADCHEM”, “DYCOPS”, “Conference on Decision & Control”, “CIFA”, “IEEE CASE”, “ESCAPE”, “ECOS”, “Congrès de la Société Française de Génie des Procédés”...

J’ai été à plusieurs reprises “chairman” de session et membre de l’“IPC” de certaines de ces conférences.

Enfin depuis quelques mois, j'ai été identifié comme expert par l'ANR, et j'ai réalisé ma première relecture de demande de financement en avril 2013.

## Annexe D

# Liste des publications

### D.1 Revues internationales à comité de lecture (17 + 2 soumises + 2 à soumettre)

- P1 ii Betz for Kites : Power Generation Using Tethered Wings ii, S. Costello, C. Costello, G. François et D. Bonvin, *Renewable Energy*, accepté, 2014.
- P2 ii Equivalence between neighboring-extremal control and self-optimizing control for the steady-state optimization of dynamical systems ii, G. François, B. Srinivasan et D. Bonvin., *Industrial and Engineering Chemistry Research*, vol. 53(18), pp. 7470-7478, 2014.
- P3 ii Use of Transient Measurements for Static Real-Time Optimization via Modifier Adaptation ii, G. François et D. Bonvin, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, vol. 53(13), 2014, pp. 5148-5159.
- P4 ii A Real-Time Optimization Framework for the Iterative Controller Tuning Problem ii, G. Bunin, G. François et D. Bonvin, *Processes*, vol. 1(2), 2013, pp. 203-237.
- P5 ii Use of Convex Model Approximations for Real-Time Optimization via Modifier Adaptation ii, G. François et D. Bonvin, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, vol. 52(33), 2013, pp. 11614-11625.
- P6 ii From Discrete Measurements to Bounded Gradient Estimates : A Look at Some Regularizing Structures ii, G. Bunin, G. François et D. Bonvin, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, vol. 52(35), 2013, pp. 12500-12513.
- P7 ii Measurement-based Real-time Optimization of Chemical Processes ii, G. François et D. Bonvin, *Advances in Chemical Engineering*, vol. 43, 2013, pp. 1–50.
- P8 ii Run-to-Run MPC Tuning via Gradient Descent ii, G.A. Bunin, F. Traire Tirado, G. François and D. Bonvin *Computer-Aided Chemical Engineering*, vol. 30, 2012, pp. 927–931.

- P9 ⇓ Comparison of Six Implicit Real-time Optimization Schemes ⇓, G. François, B. Srinivasan, et D. Bonvin, *Journal Européen des Systèmes Automatisés*, vol. 46(2-3), 2012, pp. 291–305.
- P10 ⇓ Experimental Real-Time Optimization of a Solid Oxide Fuel Cell Stack via Constraint Adaptation ⇓, AG. Bunin, Z. Willemin, G. François, A. Nakajo, L. Tsikonis, et D. Bonvin *Energy*, vol. 39, 2012, pp. 54-62.
- P11 ⇓ Optimal service pricing for a cloud cache ⇓, V. Kantere, D. Dash, G. François, S. Kyriakopoulou, et A. Ailamaki, *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, vol. 23(9), 2011, pp. 1345–1358.
- P12 ⇓ Comparison of Gradient Estimation Methods for Real-time Optimization ⇓, B. Srinivasan, G. François, and D. Bonvin, *Computer-Aided Chemical Engineering*, vol. 29, 2011, pp. 607–611.
- P13 ⇓ A Minimal Exercise Extension for Models of the Glucoregulatory System ⇓, A. Bock, G. François, T. Prud’Homme, and D. Gillet, *Computer-Aided Chemical Engineering*, vol. 29, 2011, pp. 1520–1524.
- P14 ⇓ A Globally Convergent Algorithm for the Run-to-Run Control of Systems with Sector Nonlinearities ⇓, G. François, B. Srinivasan, et D. Bonvin, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, vol. 50(3), 2011, pp. 1410–1418.
- P15 ⇓ Use of Measurements for Enforcing the Necessary Conditions of Optimality in the Presence of Constraints and Uncertainty ⇓, G. François, B. Srinivasan, et D. Bonvin, *Journal of Process Control*, vol. 16(6), 2005, pp. 701–712.
- P16 ⇓ Run-to-run Adaptation of a Semi-Adiabatic Policy for the Optimization of an Industrial Batch Polymerization Process ⇓, G. François, B. Srinivasan, D. Bonvin, J. Hernandez Barajas, et D. Hunkeler, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, vol. 43(23), 2004, pp. 7238–7242.
- P17 ⇓ Dynamic Optimization of Batch Emulsion Polymerization using Simulated Annealing ⇓, R. M. Lima, G. François, B. Srinivasan, et R. L. Salcedo, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, vol. 43(24), 2004, pp. 7796–7806.

Nous avons également soumis et/ou allons soumettre très prochainement les publications suivantes :

- PS1 ⇓ A Benchmark Problem for Advanced Control and Dynamic Optimization : Kite Control ⇓, S. Costello, G. François et D. Bonvin, *Control Engineering Practice*, soumis, 2014.
- PS2 ⇓ Feasible Side Global Convergence in Experimental Optimization ⇓, G. Bunin, G. François et D. Bonvin, *SIAM Journal on Optimization*, soumis, 2014.
- PS3 ⇓ Estimating reliability of blood glucose concentration predictions in patients with type 1 diabetes mellitus ⇓, A. Bock, G. François et D. Gillet, *Comput. Meth. and Prog. in Biomedecine*, soumis 2014.

PS4 ⇐ A therapy parameter-based model for predicting blood glucose concentrations in patients with type 1 diabetes ⇐, A. Bock, G. François et D. Gillet, *Comput. Meth. and Prog. in Biomedecine*, soumis en juin 2013 (2<sup>ème</sup> tour en cours).

D'autres articles sont en cours de rédaction, mais ne sont pas indiqués ici, car leur préparation n'est pas assez avancée.

## D.2 Actes de congrès internationaux à comité de lecture (22)

- CA1 ⇐ Real-Time Optimization : Optimizing the Operation of Energy Systems in the Presence of Uncertainty and Constraints ⇐, G. François and D. Bonvin, *13th International Conference on Sustainable Energy Technologies*, acceptée, Geneva, Switzerland, 2014.
- CA2 ⇐ Real-Time Optimization of Kites ⇐, S. Costello, G. François, D. Bonvin et A. Marchetti, *19th World Congress of the International Federation of Automatic Control (IFAC)*, acceptée, Cape Town, South Africa, 2014.
- CA3 ⇐ Iterative Controller Tuning by Real-Time Optimization ⇐, G. Bunin, G. François, et D. Bonvin, *In the 10th International IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems (DYCOPS)*, pp-21-26, Mumbai, India, 2013.
- CA4 ⇐ Real-Time Optimization when the Plant and the Model have Different Inputs ⇐, S. Costello, G. François, et D. Bonvin, *In the 10th International IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems (DYCOPS)*, pp. 39-44, Mumbai, India, 2013.
- CA5 ⇐ Use of Transient Measurements for Real-Time Optimization via Modifier Adaptation ⇐, G. François, et D. Bonvin. *XIV Congrès de la SFGP*, Lyon, France, accepté, octobre 2013.
- CA6 ⇐ Real-Time Optimization of Kites ⇐, S. Costello, G. François, et D. Bonvin, *5th IFAC International Workshop on Periodic Control Systems*, pp. 64-69, Caen, France, 2013.
- CA7 ⇐ Exploiting Local Convexity for Gradient Estimation in Modifier-Adaptation Schemes ⇐, G. Bunin, G. François, et D. Bonvin, *The 2012 American Control Conference*, pp 2806– 2811, Montréal, Canada, 2012.
- CA8 ⇐ Run-to-Run MPC Tuning via Gradient Descent ⇐, G.A. Bunin, F. Traire Tirado, G. François and D. Bonvin, *Proceedings of the 22<sup>nd</sup> European Symposium on Computer-Aided Process Engineering*, pp. 927–931, Londres, UK, 2012.
- CA9 ⇐ Preclinically Assessed Optimal Control of Postprandial Glucose Excursions for Type 1 Patients with Diabetes ⇐, T. Prud'Homme, A. Bock, G. François, et D. Gillet, *In Proceedings of the 2011 IEEE Conference on Automation Science and Engineering*, pp. 702–707, Trieste, Italie, 2011.

- CA10 j Modifier Adaptation for Run-to-Run Optimization of Transient Processes j, S. Costello, G. François, B. Srinivasan, et D. Bonvin, *In 18th World Congress of the International Federation of Automatic Control (IFAC)*, pp- 11471–11476, Milan, Italie, 2011.
- CA11 j Input Filter Design for Feasibility in Constraint-Adaptation Schemes j, G. Bunin, G. François, B. Srinivasan, et D. Bonvin. *In 18th World Congress of the International Federation of Automatic Control (IFAC)*, pp. 5585–5590, Milan, Italie, 2011.
- CA12 j Comparison of Gradient Estimation Methods for Real-time Optimization j, B. Srinivasan, G. François, and D. Bonvin, *Proceedings of the 21<sup>st</sup> European Symposium on Computer-Aided Process Engineering*, pp. 607–611, Chalkidiki, Grèce, 2011. [Communication orale].
- CA13 j A Minimal Exercise Extension for Models of the Glucoregulatory System j, A. Bock, G. François, T. Prud’Homme, and D. Gillet, *Proceedings of the 21<sup>st</sup> European Symposium on Computer-Aided Process Engineering*, pp. 1520–1524, Chalkidiki, Grèce, 2011.
- CA14 j Experimental Real-Time Optimization of a Solid Oxide Fuel Cell Stack via Constraint Adaptation j, G. Bunin, Z. Wullemin, G. François, A. Nakajo, L. Tsikonis, et D. Bonvin, *In Proceedings of 23rd International Conference on Efficiency, Cost, Optimization, Simulation and Environmental Impact of Energy Systems*, vol. V - Fuel Cell and International Combustion Engines, pp 141–148, Lausanne, Switzerland, 2010.
- CA15 j Two-Layered Real-Time Optimization of a Solid Oxide Fuel Cell Stack j G. Bunin, G. François, and D. Bonvin. *In Proceedings of the 9th International IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems (DYCOPS)*, pp. 839–844, Leuven Belgium, 2010.
- CA16 j Gestion des ressources énergétiques d’un bâtiment : contrôle flou j, B. Paris, J. Eynard, G. François, T. Talbert, A. Traore, et F. Thiery. *In International Building Performance Simulation Association Conference*, Glasgow, Scotland, 2008.
- CA17 j A prototype for on-line monitoring and control of energy performance for renewable energy buildings j, B. Paris, J. Eynard, G. François, T. Talbert, et M. Polit. *In Proceedings of the 5th International Conference on Informatics in Control, Automation and Robotics*, vol. SPSMC, pp. 125–130, Funchal, Portugal, 2008.
- CA18 j A Globally Convergent Run-to-run Control Algorithm with Improved Rate of Convergence j, G. François, B. Srinivasan, et D. Bonvin. *In Proceedings of the 2005 American Control Conference*, pp. 1901–1906, Portland, USA, 2005.
- CA19 j Trajectory Following for the Optimization of a Batch Polymerization Reactor j, C. Welz, G. François, B. Srinivasan, D. Bonvin, et D. Hunkeler. *In BatchPro Symposium*, pp. 153–159, Greece, 2004.



- CA20 ij Run-to-Run Optimization of Batch Styrene Copolymerization ij, G. François, B. Srinivasan, et D. Bonvin. In *Polymer Reaction Engineering : Modelling, Optimization and Control*, pp. 108–110, Lyon, France, 2003.
- CA21 ij Measurement-Based Optimization of an Emulsion Polymerization Process ij, G. François, B. Srinivasan, D. Bonvin, et D. Hunkeler. In *Polymer Reaction Engineering : Modelling, Optimization and Control*, pp. 16-19, Lyon, France, 2003, [Keynote].
- CA22 ij Convergence Analysis of Run-to-Run Control for a Class of Nonlinear Systems ij, G. François, B. Srinivasan, et D. Bonvin. In *Proceedings of the 2003 American Control Conference*, pp. 3032–3037, Denver, USA, 2003.
- CA23 ij Run-to-run Optimization of Batch Emulsion Polymerization ij, G. François, B. Srinivasan, et D. Bonvin. In *Proceedings of the 15th IFAC World Congress*, pp. 1258–1263, Barcelona, Spain, 2002.

### D.3 Congrès internationaux sans actes (5)

- CS1 ij Real-Time Optimization of Chemical Processes ij, D. Bonvin, G. François, et G. Bunin. *XIV Congrès de la Société Française de Génie des Procédés*, Lyon, France, Octobre 2013 [Lecture Plénière]
- CS2 ij Optimal service pricing for a cloud cache ij, V. Kantere, D. Dash, G. François, S. Kyriakopoulou, et A. Ailamaki, *10th Hellenic Data Management Symposium (HDMS 2011)*, Athènes, Grèce, 17-18 Juin 2011 Allemagne [Poster]
- CS3 ij Model Predictive Control of an Experimental Solid Oxide Fuel Cell Stack ij, G. Bunin, Z. Wuillemin, G. François, S. Diethelm, A. Nakajo, et D. Bonvin, *7th Symposium on Fuel Cell Modeling and Experimental Validation*, Morges, Suisse, 23-24 Mars 2010. [Communication orale]
- CS4 ij Optimisation basée sur les mesures d’un réacteur industriel de copolymérisation ij, G. François, B. Srinivasan, D. Bonvin, et D. Hunkeler, *16ème Ecole de Printemps Francophone de Casablanca - Contrôle et Procédés de Polymérisation et de Cristallisation*, Casablanca, Maroc, 2004 [Communication orale]
- CS5 ij Run-to-run Optimization of Batch Polymerization Processes ij, G. François, *Knowledge- Driven Batch Production (BATCHPRO) Mid-Term Assessment Meeting*, CPERI Thessalonique, Grèce, 9-11 Octobre 2002 [Communication orale].

### D.4 Chapitres d’Ouvrages Monographies, Archives Ouvertes (5+3)

- COM1 ij Modeling and Control for the Treatment of Type 1 Diabetes : An Approach Based on Therapy Parameters ij, .A. Bock, Doctorat ès Sciences EPFL encadré par D. Gillet & G. François, soutenu en février 2014.

- COM2 ¶ Control of Polymerization Processes ¶, B. Ogunnaike, G. François, M. Soroush, et D. Bonvin, *In W. S. Levine, editor, The Control Handbook, 2nd Edition : Control System Applications, SECTION III Industrial.*, CRC Press, 2010.
- COM3 ¶ Cost Modeling of Thermoplastic P4 Process Technology ¶, M.D. Wakeman, G. François, et J.-A.E. Manson., *Progress Report for the Automotive Composites Consortium*, EPFL, Avril 2006.
- COM4 ¶ Measurement-based run-to-run optimization of batch processes : application to industrial acrylamide copolymerization ¶. G. François, Doctorat ès Sciences EPFL encadré par D. Bonvin & B. Srinivasan, soutenu en décembre 2004.
- COM5 ¶ Optimisation dynamique d'un système à paramètres distribués : application à la réduction du nitrobenzène dans un réacteur électrochimique à plaques planes parallèles ¶, DEA de l'Institut National Polytechnique de Lorraine, encadré par A. Latifi, soutenu en octobre 1998.

Ont été proposées en archive ouverte :

- PO1 ¶ A Benchmark Problem for Advanced Control and Dynamic Optimization : Kite Control ¶, S. Costello, G. François et D. Bonvin, <http://infoscience.epfl.ch/record/198485?ln=en>, 2014.
- PO2 ¶ Sufficient Conditions for Feasibility and Optimality of Real-Time Optimization Schemes – I. Theoretical Foundations ¶, G. Bunin, G. François et D. Bonvin, *arXiv :1308.2620*, 2013.
- PO3 ¶ Sufficient Conditions for Feasibility and Optimality of Real-Time Optimization Schemes – II. Implementation Issues ¶, G. Bunin, G. François et D. Bonvin, *arXiv :1308.2625*, 2013.

## D.5 Séminaires Invités et Symposiums (13)

- SIS1 ¶ Real-Time Optimization of Solid Oxide Fuel Cells ¶, G. Bunin, T. De Avila Ferreira, G. François, T. Faulwasser et D. Bonvin, *SOF-CH Workshop*, Murten, Suisse, 12-13 Mai 2014.
- SIS2 ¶ Kites@EPFL : Modeling the Wedge ¶, S. Costello, E. Martinoli, P. Bertusi, D. Benoît, G. François et D. Bonvin, *Annual Swiss-Kite-Power Workshop*, Pontresina, Suisse, 7-8 Mars 2013.
- SIS3 ¶ SCFO for the SOFC : On-Line Adaptation for Maximal Efficiency ¶, S. Costello, C. Costello, G. François et D. Bonvin, *SOF-CH Workshop, EMPA*, Dübendorf, Suisse, 16 Novembre 2012.
- SIS4 ¶ Betz for Kites : The Fundamentals of Power Generation ¶, S. Costello, C. Costello, G. François et D. Bonvin, *Annual Swiss-Kite-Power Workshop*, Pontresina, Suisse, 23-24 Février 2012.

- SIS5    ¶ Table ronde formation I. Formations francophones en Génie des Procédés : Etat des lieux et synergies d'amélioration ¶, E. Schaer, M. Crine, G. François, A-M. Billet, P. Tanguy, S. Belaadi, P. Degand, et F. Augier, *XIII Congrès de la Société Française de Génie des Procédés* , Lille, France, 28 Novembre -1 Décembre, 2011.
- SIS6    ¶ Optimisation temps réel en présence d'incertitude et de contraintes ¶, G. François, G.A. Bunin, et D. Bonvin, *Séminaires du LAGEP* , CPE Lyon, France, 20 Janvier 2011.
- SIS7    ¶ Optimization in the Presence of Uncertainty ¶, G. François et D. Bonvin, *Séminaires de Roche Disentronics* , Burgdorf, Suisse, 15 Mars 2010.
- SIS8    ¶ From Model-Based Open-loop Optimization Strategies to Feedback-Based Optimization via NCO Tracking ¶, G. François, *Séminaires du Groupe de Travail Commande Prédictive Nonlinéaire*, Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers, Paris, France, 5 Juin 2008.
- SIS9    ¶ A prototype for on-line monitoring and optimization of energy performance for renewable energy buildings, using MPC ¶, G. François, *Séminaires du Groupe de Travail Commande Prédictive Nonlinéaire*, Ecole Nationale Supérieure des Arts et Métiers, Paris, France, 5 Juin 2008.
- SIS10    ¶ Optimisation Basée sur les Mesures, possibilité d'application à la digestion anaérobie ¶, G. François, *Séminaires du Projet ARC-CODA*, COMORE, INRIA Sophia-Antipolis, France, 16 Mai 2007.
- SIS11    ¶ Optimisation Basée sur les Mesures ¶, G. François, *Séminaires du Projet INRA-INRIA " MERE "*, Montpellier, France, 19 Mars 2007.
- SIS12    ¶ Measurement-based Optimization of Batch Processes via NCO-tracking with Application to Industrial Acrylamide Inverse-Emulsion Copolymerization ¶, G. François, *Strong Point Center in Process Systems Engineering*, NTNU, Trondheim, Norvège, 3 Juin 2005.
- SIS13    ¶ Measurement-based Run-to-run optimization of batch Processes : Application to Industrial Acrylamide Copolymerization ¶, G. François, *Séminaires du LA*, EPFL, Lausanne, Suisse, 29 Octobre 2004.

# Bibliographie

- [1] N. Alexandrov, J. E. Dennis, R. M. Lewis, and V. Torczon. A trust region framework for managing the use of approximation models in optimization. Technical report, Langley Research Center, 1997.
- [2] V. Alstad and S. Skogestad. Null space method for selecting optimal measurement combinations as controlled variables. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 46(3) :846–853, 2007.
- [3] K.B. Ariyur and M. Krstic. *Real-Time Optimization by Extremum-Seeking Control*. John Wiley, New York, 2003.
- [4] K.J. Arrow, L. Hurwicz, and H. Uzawa. *Studies in Linear and Nonlinear Programming*. Stanford University Press, 1958.
- [5] M.S. Bazarra, H.D. Sherali, and C.M. Shetty. *Nonlinear Programming : Theory and Algorithms*. John Wiley and Sons, 2nd edition, New York, USA, 1993.
- [6] R.N. Bergman, Y. Z. Ider, C.R. Bowden, and C. Cobelli. Quantitative estimation of insulin sensitivity. *Am. J. Physiol. Gastrointest. Liver Physiol.*, 236(6) :G667–677, 1979.
- [7] R.N. Bergman, L.S. Phillips, and C. Cobelli. Physiologic evaluation of factors controlling glucose tolerance in man. *J. Clin. Invest.*, 68 :1456–1467, 1981.
- [8] L. Biegler, A. Cervantes, and A. Wchter. Advances in simultaneous strategies for dynamic process optimization. *Chem. Eng. Sci.*, 57 :575 – 593, 2002.
- [9] L. T. Biegler, I. E. Grossmann, and A. W. Westerberg. A note on approximation techniques used for process optimization. *Comput. Chem. Eng.*, 9(2) :201–206, 1985.
- [10] A. Bock. *Modeling and Control for the Treatment of Type 1 Diabetes : An Approach Based on Therapy Parameters (No. 6084)*. PhD thesis, EPFL, 2014.
- [11] A. Bock, G. Francois, and D. Gillet. A minimal exercise extension for models of the glucoregulatory system. *Comput. Aided Chem. Eng.*, 29(A) :1520–1524, 2011.

- [12] A. Bock, G. Francois, and D. Gillet. A therapy parameter-based model for predicting blood glucose concentrations in patients with type 1 diabetes. *Comput. Meth. and Prog. in Biomedecine*, submitted, 2013.
- [13] A. Bock, G. Francois, and D. Gillet. Estimating reliability of blood glucose concentration predictions in patients with type 1 diabetes mellitus. *to be submitted*, 2014.
- [14] D. Bonvin and B. Srinivasan. On the role of the necessary conditions of optimality in structuring dynamic real-time optimization schemes. *Comput. Chem. Eng.*, 51 :172–180, 2013.
- [15] D. Bonvin, B. Srinivasan, and D. Ruppen. Dynamic optimization in the batch chemical industry. In *Chemical Process Control-VI*, Tucson, AZ, 2001.
- [16] G. E. P. Box and N. R. Draper. *Evolutionary Operations*. John Wiley & Sons, 1969.
- [17] G. E. P. Box and K. B. Wilson. On the experimental attainment of optimum conditions. *J. Royal Stat. Society. Series B (Methodological)*, 13(1) :1–45, 1951.
- [18] S.P. Boyd and L. Vandenberghe. *Convex Optimization*. Cambridge University Press, U.K., 2004.
- [19] M. A. Brdys and P. Tatjewski. *Iterative Algorithms for Multilayer Optimizing Control*. Imperial College Press, 2005.
- [20] G. Bunin, G. Francois, and D. Bonvin. From discrete measurements to bounded gradient estimates : A look at some regularizing structures. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 52(35) :12500–12513, 2013.
- [21] G. Bunin, G. Francois, and D. Bonvin. A real-time optimization framework for the iterative controller tuning problem. *Processes*, 1(2) :203–237, 2013.
- [22] G. Bunin, G. Francois, and D. Bonvin. Sufficient conditions for feasibility and optimality of real-time optimization schemes - I. theoretical foundations. *arXiv :1308.2620*, 2013.
- [23] G. Bunin, G. Francois, and D. Bonvin. Sufficient conditions for feasibility and optimality of real-time optimization schemes - II. implementation issues. *arXiv :1308.2625*, 2013.
- [24] G. Bunin, G. Francois, and D. Bonvin. Feasible side global convergence in experimental optimization. *SIAM Journal on Optimization*, 2014, submitted.
- [25] G. Bunin, F.V. Lima, C. Georgakis, and C.M. Hunt. Model predictive control and dynamic operability studies in a stirred tank : Rapid temperature cycling for crystallization. *Chem. Eng. Com.*, 197 :733–752, 2010.
- [26] G. Bunin, Z. Wullemmin, G. Francois, A. Nakajo, L. Tsikonis, and D. Bonvin. Experimental real-time optimization of a solid oxide fuel cell stack via constraint adaptation. *Energy*, 39(1) :54–62, 2012.

- [27] G. A. Bunin, F. Fraire, G. François, and D. Bonvin. Run-to-run MPC tuning via gradient descent. *Comput. Aided Chem. Eng.*, pages 927–931, 2012.
- [28] G. A. Bunin, G. François, and D. Bonvin. Iterative controller tuning by real-time optimization. In *Dynamics and Control of Process Systems (DYCOPS)*, pages 21–26, 2013.
- [29] G. A. Bunin, G. François, B. Srinivasan, and D. Bonvin. Input filter design for feasibility in constraint-adaptation schemes. In *18th IFAC World Congress (Milan)*, pages 5585–5590, 2011.
- [30] G. A. Bunin, Z. Wullemmin, G. Francois, A. Nakajo, L. Tsikonis, and D. Bonvin. Experimental RTO of an SOFC stack via constraint adaptation. In *23rd ECOS Conference*, volume V, pages 141–148, 2010.
- [31] F.B. Cameron, W. Bequette, D.M. Wilson, B.A. Buckingham, H. Lee, and G. Niemeyer. A closed-loop artificial pancreas based on risk management. *J. Diabetes Sci. Technol.*, 5(2) :368–379, 2011.
- [32] C. Y. Chen and B. Joseph. On-line optimization using a two-phase approach : An application study. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 26 :1924–1930, 1987.
- [33] W.L. Clarke, D. Cox, L.A. Gonder-Frederick, W. Carter, and S.L. Pohl. Evaluating clinical accuracy of systems for self-monitoring of blood glucose. *Diabetes care*, 10(5) :622–628, 1987.
- [34] A. R. Conn, K. Scheinberg, and L. N. Vicente. *Introduction to Derivative-Free Optimization*. Cambridge University Press, 2009.
- [35] The Diabetes Control and Complications Trial Research Group. The effect of intensive treatment of diabetes on the development and progression of long-term complications in insulin-dependent diabetes mellitus. *New Engl. J. Med.*, 329(14) :977–986, 1993.
- [36] H. Cormerais and P. Richard. Artificial pancreas for type 1 diabetes : Closed-loop algorithm based on error dynamics shaping. *J. of Process Cont.*, pages 1–9, 2012.
- [37] H. Cormerais and P.Y. Richard. Artificial pancreas for type 1 diabetes : Closed-loop algorithm based on error dynamics shaping. *J. of Process Cont.*, 22(7) :1219–1227, 2012.
- [38] C. D. Correa, R. Hero, and K.-L. Ma. A comparison of gradient estimation techniques for volume rendering of unstructured meshes. *IEEE Trans. Vis. Comput. Graph.*, 17(3) :305–319, 2011.
- [39] S. Costello, C. Costello, G. Francois, and D. Bonvin. Betz for kites : Power generation using tethered wings. *Renewable Energy*, accepted, 2013.
- [40] S. Costello, G. François, B. Srinivasan, and D. Bonvin. Modifier adaptation for run-to-run optimization of transient processes. In *18th World Congress of the International Federation of Automatic Control (IFAC) (Milan)*, pages 11471–11476, 2011.

- [41] S. Costello, G. Francois, and D. Bonvin. Real-time optimization for kites. In *5th IFAC International Workshop on Periodic Control Systems (PSYCO)*, pages 64–69, 2013.
- [42] S. Costello, G. Francois, and D. Bonvin. Real-time optimization when plant and model have different sets of inputs. In *Int. Symp. DYCOPS*, pages 39–44, Mumbai, India, 2013.
- [43] S. Costello, G. Francois, and D. Bonvin. A benchmark problem for advanced control and dynamic optimization : Kite control. *Infoscience*, 2014.
- [44] S. Costello, G. Francois, and D. Bonvin. A benchmark problem for advanced control and dynamic optimization : Kite control. *Con. Eng. Prac.*, 2014.
- [45] S. Costello, G. Francois, D. Bonvin, and A. Marchetti. Modifier adaptation for constrained closed-loop systems. In *The 19th World Congress of the International Federation of Automatic Control (Cape Town, South Africa)*, accepted, 2014.
- [46] C. Dalla Man, R.A. Rizza, and C. Cobelli. Meal simulation model of the glucose-insulin system. *IEEE Trans. Biomed. Eng.*, 54(10) :1740–1749, 2007.
- [47] E. Daskalaki, A. Prountzou, P. Diem, and S.G. Mougiakakou. Real-time adaptive models for the personalized prediction of glycemic profile in type 1 diabetes patients. *Diabetes tech. & therapeutics*, 14(2) :168–174, 2011.
- [48] F. Daum, J. Huang, M. Krichman, and T. Kohen. Seventeen dubious methods to approximate the gradient for nonlinear filters with particle flow. *Signal and Data Processing of Small Targets (San Diego)*, 7445, 2009.
- [49] D. DeHaan and M Guay. Extremum-seeking control of state-constrained nonlinear systems. *Automatica*, 41(9) :1567–1574, 2005.
- [50] S. Del Favero, A. Facchinetti, and C. Cobelli. A glucose-specific metric to assess predictors and identify models. *IEEE trans. on biomed.l eng.*, pages 1–9, 2012.
- [51] S. Diethelm, J. Van Herle, Z. Wullemin, A. Nakajo, N. Autissier, and M. Molinelli. Impact of materials and design on solid oxide fuel cell stack operation. *J. Fuel Cell Sci. and Tech.*, 5(3) :031003.1–031003.6, 2008.
- [52] H.-B. Durr and C. Ebenbauer. On a class of smooth optimization algorithms with applications in control. In *Preprints of 4th IFAC Nonlinear Model Predictive Control Conference*, pages 291–298, 2012.
- [53] C. Ellingsen, E. Dassau, H. Zisser, B. Grosman, M.W. Percival, L. Jovanovic, and F.J.III Doyle. Safety constraints in an artificial pancreatic cell : An implementation of model predictive control with insulin on board. *J. Diabetes Sci. Technol.*, 3(3) :536–544, 2009.
- [54] H. W. Engl, M. Hanke, and A. Neubauer. *Regularization of Inverse Problems*. Kluwer Academic Publishers, 2000.

- [55] F. C. Fatora and J. S. Ayala. Successful closed loop real-time optimization. *Hydrocarbon Processing*, 71(6) :65–68, 1992.
- [56] M. Fernandez, M. Villasana, and D. Streja. Glucose dynamics in type i diabetes : insights from the classic and linear minimal models. *Comp. in biology and medicine*, 37(5) :611–627, 2007.
- [57] J. Ferreau. *Model Predictive Control Algorithms for Applications with Millisecond Timescales*. KU Leuven, Belgium, 2011. Doctoral thesis.
- [58] D. Finan, F.J. Doyle III, C.C. Palerm, W.C. Bevier, H. Zisser, L. Jovanovic, and D.E. Seborg. Experimental evaluation of a recursive model identification technique for type 1 diabetes. *J. of diabetes sci. and tech.*, 3(5) :1192–1202, 2009.
- [59] U. Fischer, W. Schenk, E. Salzsieder, G. Albrecht, P. Abel, and E.-J. Freyse. Does physiological blood glucose control require an adaptive control strategy? *IEEE Trans. on Biomed. Eng.*, 34(8) :575–582, 1987.
- [60] C. Fleury. First- and second-order convex approximations strategies in structural optimization. *Struct. Optim.*, 1 :3–10, 1989.
- [61] J. F. Forbes, T. E. Marlin, and J. F. MacGregor. Model adequacy requirements for optimizing plant operations. *Comput. Chem. Eng.*, 18(6) :497–510, 1994.
- [62] J. F. Forbes and T.E. Marlin. Design cost : A systematic approach to technology selection for model-based real-time optimization systems. *Comput. Chem. Eng.*, 20 :717–734, 1996.
- [63] G. Francois. *Measurement-based run-to-run optimization of batch processes : application to industrial acrylamide copolymerization (No. 3128)*. PhD thesis, EPFL, 2004.
- [64] G. Francois and D. Bonvin. Measurement-based real-time optimization of chemical processes. *Adv. Chem. Eng.*, pages 1–50, 2002.
- [65] G. François and D. Bonvin. Use of convex model approximations for real-time optimization via modifier adaptation. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 52(33) :11614–11625, 2013.
- [66] G. Francois and D. Bonvin. Use of transient measurements for real-time optimization via modifier adaptation. In *Récents Progrès en Génie des Procédés, XIVème Congrès de la SFGP*, Lyon, France, 2013.
- [67] G. Francois and D. Bonvin. Real-time optimization : Optimizing the operation of energy systems in the presence of uncertainty and disturbances. In *13th Int. Conf. on Sustainable Energy Technologies*, pages E40137 :1–12, Geneva, Switzerland, 2014.
- [68] G. Francois and D. Bonvin. Use of transient measurements for static real-time optimization via modifier adaptation. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 53(13) :5148–5159, 2014.
- [69] G. Francois, B. Srinivasan, and D. Bonvin. Convergence analysis of run-to-run control for a class of nonlinear systems. In *Proceedings of the American Control Conference, Denver, Colorado*, pages 3032–3037, 2003.



- [70] G. Francois, B. Srinivasan, and D. Bonvin. A globally convergent run-to-run control algorithm with improved rate of convergence. In *Proceedings of the American Control Conference, Portland, Oregon*, pages 1901–1906, 2005.
- [71] G. Francois, B. Srinivasan, and D. Bonvin. Use of measurements for enforcing the necessary conditions of optimality in the presence of constraints and uncertainty. *J. Process Contr.*, 15(6) :701–712, 2005.
- [72] G. Francois, B. Srinivasan, and D. Bonvin. A globally convergent algorithm for the run-to-run control of systems with sector nonlinearities. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 50(3) :1410–1418, 2011.
- [73] G. Francois, B. Srinivasan, and D. Bonvin. Comparison of six implicit real-time optimization schemes. *J. Européen des Systèmes Automatisés*, 46(2-3) :291–305, 2012.
- [74] G. Francois, B. Srinivasan, D. Bonvin, J. Hernandez Barajas, and D. Hunkeler. Run-to-run adaptation of a semi-adiabatic policy for the optimization of an industrial batch polymerization process. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 43(23) :7238–7242, 2004.
- [75] G. Freckmann, A. Baumstark, N. Jendrike, E. Zschornack, S. Kocher, J. Tshiananga, F. Heister, and C. Haug. System accuracy evaluation of 27 blood glucose monitoring systems according to din en iso 15197. *Diabetes Technology and Therapeutics*, 12(3) :221–231, 2010.
- [76] W. Gao and S. Engell. Iterative set-point optimization of batch chromatography. *Comput. Chem. Eng.*, 29 :1401–1409, 2005.
- [77] C. E. Garcia and M. Morari. Optimal operation of integrated processing systems. Part II : Closed-loop on-line optimizing control. *AIChE J.*, 30(2) :226–234, 1984.
- [78] C. Georgakis. A model-free methodology for the optimization of batch processes : Design of dynamic experiments. In *7th IFAC International Symposium on Advanced Control of Chemical Processes (ADCHEM) (Istanbul)*, pages 644–649, 2009.
- [79] S. Gros, B. Srinivasan, and D. Bonvin. Optimizing control based on output feedback. *Comput. Chem. Engng.*, 33(1) :191–198, 2009.
- [80] M. Guay, D. Dochain, and M. Perrier. Adaptive extremum-seeking control of nonisothermal continuous stirred tank reactors. *Chem. Eng. Sci.*, 60 :3671–3682, 2013.
- [81] L. Heinemann. Variability of insulin absorption and insulin action. *Diabetes technology and therapeutics*, 4(5) :673–682, 2002.
- [82] N. Hernjak and F.J. Doyle III. Glucose control design using non-linearity assessment techniques. *AIChE J.*, 51(2) :544–554, 2005.
- [83] D. S. Holmes. Model-free optimization in cement plants. In *Cement Industry Technical Conference*, pages 159–173, 2003.

- [84] B. Houska. Robustness and stability optimization of open-loop controlled power generating kites. Technical report, Master Thesis, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 2007.
- [85] R. Hovorka, V. Canonico, L.J. Chassin, U. Haueter, M. Massi-Benedetti, M.O. Federici, T.R. Pieber, H.C. Schaller, L. Schaupp, T. Vering, and Wilinska M.E. Nonlinear model predictive control of glucose concentration in subjects with type 1 diabetes. *Physiological Measurement*, 25(4) :905–920, 2004.
- [86] R. Hovorka, F. Shojaei-Moradie, P.V. Carroll, L.J. Chassin, I.J. Gowrie, N.C. Jackson, R.S. Tudor, A.M. Umpleby, and R.H. Jones. Partitioning glucose distribution/transport, disposal, and endogenous production during ivgtt. *American journal of physiology. Endocrinology and metabolism*, 282(5) :E992–1007, 2002.
- [87] D. Hunkeler and A.E. Hamielec. Mechanism, kinetics and modelling of inverse-microsuspension polymerization : 2. Copolymerization of acrylamide with quaternary ammonium cationic monomers. *Polymer*, 32(14) :2626–2640, 1991.
- [88] D. Hunkeler, A.E. Hamielec, and W. Baade. Mechanism, kinetics and modelling of the inverse-microsuspension homopolymerization of acrylamide. *Polymer*, 30 :127–142, 1989.
- [89] S.-S. Jang, B. Joseph, and H. Mukai. On-line optimization of constrained multivariable chemical processes. *AIChE J.*, 33(1) :26–35, 1987.
- [90] S.S. Kanderian, S.A. Weinzimer, G. Voskanyan, and Steil G.M. Identification of intraday metabolic profiles during closed-loop glucose control in individuals with type 1 diabetes. *J. of diabetes sci. and tech.*, 3(5) :1047–1057, 2009.
- [91] V. Kantere, D. Dash, G. Francois, S. Kyriakopolou, and A. Ailamaki. Optimal service pricing for a cloud cache. *IEEE Trans. on Knowledge and Data Eng.*, 23(9) :1345–1358, 2011.
- [92] N. J. Killingsworth and M. Krstić. PID tuning using extremum seeking : Online, model-free performance optimization. *Control Systems, IEEE*, 26(1) :70–79, 2006.
- [93] M. Krstic and H.-H. Wang. Stability of extremum seeking feedback for general nonlinear dynamic systems. *Automatica*, 36 :595–601, 2000.
- [94] R. Lima, G. Francois, B. Srinivasan, and R. Salcedo. Dynamic optimization of batch emulsion polymerization using msimpsa, a simulated-annealing-based algorithm. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 43(24) :7796–7806, 2004.
- [95] L. Ljung. *System Identification – Theory for the user (2nd ed.)*. Prentice Hall, Upper Saddle River, N.J., 1999.
- [96] M.L. Loyd. Crosswind kite power. *J. of Energy*, 4(3) :106–111, 1980.

- [97] M. Mansour and J. E. Ellis. Comparison of methods for estimating real process derivatives in on-line optimization. *Appl. Math. Model.*, 27(4) :275–291, 2003.
- [98] A. Marchetti. *Modifier-Adaptation Methodology for Real-Time Optimization (No. 4449)*. PhD thesis, EPFL, 2009.
- [99] A. Marchetti, B. Chachuat, and D. Bonvin. Modifier-adaptation methodology for real-time optimization. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 48 :6022–6033, 2009.
- [100] A. Marchetti, B. Chachuat, and D. Bonvin. A dual modifier-adaptation approach for real-time optimization. *J. Process Control*, 20(9) :1027–1037, 2010.
- [101] T.E. Marlin and A.N. Hrymak. Real-time operations optimization of continuous processes. *AIChE Symposium Series - CPC-V*, 93 :156–164, 1997.
- [102] T. H. Meyer, M. Eriksson, and R. C. Maggio. Gradient estimation from irregularly spaced data sets. *Math. Geol.*, 33(6) :693–717, 2001.
- [103] R. H. Myers, D. C. Montgomery, and C. M. Anderson-Cook. *Response Surface Methodology*. John Wiley & Sons, 2009.
- [104] M. R. Naysmith and P. L. Douglas. Review of real-time optimization in the chemical process industries. *Developments in Chemical Engineering and Mineral Processing*, 3(2) :67–87, 1995.
- [105] C. Owens, H. Zisser, L. Jovanovic, B. Srinivasan, D. Bonvin, and F.J. Doyle III. Run-to-run control of blood glucose concentrations for people with type 1 diabetes mellitus. *IEEE Trans. on Biomed. Eng.*, 53(6) :996–1005, 2006.
- [106] B. Paris, J. Eynard, G. Francois, T. Talbert, and M. Polit. Gestion des ressources énergétiques d’un bâtiment : contrôle flou. In *In Proceedings of the 5th International Conference on Informatics in Control, Automation and Robotics, Funchal, Portugal*, volume SPSMC, pages 125–130, 2008.
- [107] B. Paris, J. Eynard, G. Francois, T. Talbert, A. Traore, and F. Thiery. Gestion des ressources énergétiques d’un bâtiment : contrôle flou. In *In Proceedings of the International Building Performance Simulation Association Conference, Glasgow, Scotland*, 2008.
- [108] M.W. Percival, W.C. Bevier, Y. Wang, E. Dassau, H.C. Zisser, L. Jovanovic, and F.J. Doyle III. Modeling the effects of subcutaneous insulin administration and carbohydrate consumption on blood glucose. *J. of diabetes sci. and tech.*, 4(5) :1214–1228, 2010.
- [109] M.W. Percival, W.C. Bevier, H. Zisser, L. Jovanovic, D.E. Seborg, and F.J. Doyle III. Prediction of dynamic glycemic trends using optimal state estimation. In *Proceedings of the 17th World Congress IFAC, (Seoul, Korea)*, pages 4222–4227, 2008.
- [110] G. Pillonetto, G. Sparacino, and C. Cobelli. Numerical non-identifiability regions of the minimal model of glucose kinetics : superiority of bayesian estimation. *Mathematical Biosciences*, 184(1) :53–67, 2003.

- [111] T. Prud'homme, A. Bock, G. Francois, and D. Gillet. Preclinically assessed optimal control of postprandial glucose excursions for type 1 patients with diabetes. In *Proceedings of the 2011 IEEE Conference on Automation Science and Engineering, (Trieste, Italy)*, pages 702–707, 2011.
- [112] A. D. Quelhas, N. J. C. De Jesus, and J. C. Pinto. Common vulnerabilities of rto implementations in real chemical processes. *Can. J. Chem. Eng.*, 91(5) :652–668, 2012.
- [113] F. Reney, M. Perrier, and B. Srinivasan. Influence of differences in system dynamics in the context of multi-unit optimization. In *Int. Symp. ADCHEM*, pages 557–562, Istanbul (Turkey), 2009.
- [114] P. D. Roberts. Algorithms for integrated system optimisation and parameter estimation. *Electron. Lett.*, 14(6) :196–197, 1978.
- [115] O. Rotava and A. C. Zanin. Multivariable control and real-time optimization – An industrial practical view. *Hydrocarbon Process.*, 84(6) :61–71, 2005.
- [116] D. Ruppen, D. Bonvin, and D. Rippin. Implementation of adaptive optimal operation for a semi-batch reaction system. *Comput. Chem. Eng.*, 22(1-2) :185–199, 1998.
- [117] F.J. Serralunga, M.C. Mussati, and P.A. Aguirre. A benchmark problem for advanced control and dynamic optimization : Kite control. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 52(47) :16795–16810, 2013.
- [118] B. Srinivasan. Real-time optimization of dynamic systems using multiple units. *Int. J. Robust Nonlinear Control*, 17 :1183–1193, 2007.
- [119] B. Srinivasan and D. Bonvin. Interplay between identification and optimization in run-to-run optimization schemes. In *Proceedings of the American Control Conference*, pages 2174–2179, 2002.
- [120] B. Srinivasan, G. Francois, and D. Bonvin. Comparison of gradient estimation methods for real-time optimization. *Comput.-Aided Chem. Eng.*, 29 :607–611, 2011.
- [121] B. Srinivasan, S. Palanki, and D. Bonvin. Dynamic optimization of batch processes : I. Characterization of the nominal solution. *Comp. Chem. Eng.*, 27(1) :1–26, 2003.
- [122] R.H. Unger and S. Grundy. Hyperglycemia as an inducer as well as a consequence of impaired islet cell function and insulin resistance : implications for the management of diabetes. *Diabetologia*, 28 :119–121, 1985.
- [123] V.S. Vassiliadis, W.H. Sargent, and C.C. Pantelides. Solution of a class of multistage dynamic optimization problems. 1. problems without path constraints. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 33(9) :2123–2133, 1994.
- [124] T.J. Williams and R.E. Otto. A generalized chemical processing model for the investigation of computer control. *AIIE Trans.*, 79(5) :458–473, 1960.

- [125] L. Woodward, M. Perrier, and B. Srinivasan. Improved performance in the multi-unit optimization method with non-identical units. *J. Process Contr.*, 19(2) :205–215, 2009.
- [126] L. Woodward, M. Perrier, and B. Srinivasan. A simultaneous approach for correcting differences between units in multi-unit optimization. In *Int. Symp.DYCOPS*, pages 749–754, Leuven, Belgium, 2010.
- [127] Z. Willemin. *Experimental and Modeling Investigations on Local Performance and Local Degradation in SOFC (No. 4525)*. PhD thesis, EPFL, 2009.
- [128] G. X. Xu and S. Cheng. Algorithm for steady-state optimizing control of industrial processes. *Control and Decision*, 23(6) :619–625, 2008.
- [129] Y. L. Yeow, J. Isac, F. A. Khalid, Y.-K. Leong, and A. S. Lubansky. A method for computing the partial derivatives of experimental data. *AIChE J.*, 56(12) :3212–3224, 2010.
- [130] K. Zarkogianni, A. Vazeou, S. Mougiakakou, A. Prountzou, and K. Nikita. An insulin infusion advisory system based on autotuning nonlinear model-predictive control. *IEEE Trans. Biomed. Eng.*, 58(9) :2467–2477, 2011.
- [131] W.-H. Zhang and C. Fleury. A modification of convex approximation methods for structural optimization. *Comput. Struct.*, 64(1-4) :89–95, 1997.
- [132] Y. Zhang, D. Monder, and J. F. Forbes. Real-time optimization under parametric uncertainty : A probability constrained approach. *J. Process Control*, 12 :373–389, 2002.